

307. 226

13  
1965

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XIII. KÖTET

I. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1965



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL : BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok közlésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat-füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt megjelent munkájáért 100 különlenyomat illet meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# NEUTRON-DOZIMETRIA\*

MAKRA ZSIGMOND

KFKI, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

### Bevezetés.

1. Neutronsugárzás és testszövet kölcsönhatása.
2. Közvetett dózismeghatározás, fluxus- és spektrumméréssel.
  - 2.1. Neutron átlagenergia mérés moderátorral, a termalizálódott neutronok eloszlásának meghatározása útján.
  - 2.2. Neutronenergia mérés moderátor gömbökkel.
  - 2.3. De Pangher kettős moderátoros dozimétere.
  - 2.4. Neutronspektrum mérés küszöbdetektorokkal.
3. Dózismérés testekvivalens detektorral.
  - 3.1. Testekvivalens ionizációs kamra.
  - 3.2. Hurst-féle proporcionális számláló.
4. A szövetdózis görbét közelítő karakterisztikájú dózismérők.
  - 4.1. Protonradiátoros proporcionális számláló.
  - 4.2. Neutronlassításon alapuló dózisintenzitás mérők.
    - 4.2.1. Anderson és Braun REM számlálója.
    - 4.2.2. Moderátor gömbös REM számláló.
    - 4.2.3. Intermedier neutrontdózis detektor.
5. Összefoglalás.
6. Irodalomjegyzék.

### Bevezetés

A dozimetria feladata a  $k$  sugárzás-fajta által valamely  $i$  közegben leadott energia — a dózis — meghatározása. Az  $i$  közeg által elnyelt dózis egyrészt a közegnek a minőségétől, másrészt a sugárzástól függ. A kölcsönhatásba lépő sugárzás szerint különböztetünk meg béta, gamma, neutron, stb. dozimetriát, a közeg szerint pedig tulajdonképpen annyi féle dózist definiálhatunk, ahány féle közeget vizsgálunk. Ezek közül azonban csak néhánynak van gyakorlati jelentősége, pl. a vizes oldatoknak és különféle szerves vegyületeknek leadott dózissnak (a sugárhatás kémiában), vagy a testszöveteknek (csont, zsír, izomszövet, stb.) átadott dózissnak a sugárbiológiában és a sugárvédelemben.

Az ionizáló sugárzásból elnyelt energia hővé alakul, ezért kézenfekvő lenne a kalorimetrikus mérés, sok esetben azonban az elnyelt energia sűrűsége olyan kicsi, hogy ez a módszer nem vezet célra. E helyett gázionizáción, kémiai hatáson, szcintilláción, fotografikus hatáson, stb. alapuló detektorokat használunk. Ezeknek anyagi összetétele általában eltér a vizsgálandó közegétől, így a detektorban elnyelt energia is eltér a közegben elnyelttől. A dózismérés feltétele olyan detektorokat

\* Érkezett 1964. május 12.



alkotni, amelyekkel ennek ellenére is az *i* közegben elnyelt dózist lehet meghatározni.

A következőkben csak a *neutron sugárzás* dozimetriájával foglalkozunk és a különféle közegek közül is csak a sugárvédelemben és sugárbiológiában alapvető fontosságú *testszövetet* tekintjük. „Testszöveten” az „átlagos ember” egész testre átlagolt anyagi összetételét értjük (I. I. táblázat). A sugárvédelem és sugárbiológia igényeinek megfelelően a tárgyalást tovább szűkítjük: nem foglalkozunk az igen nagy intenzitások (nagyobb mint  $10^4$  rad/óra) mérésével. Összefoglalva, dolgozatunk célja: a  $10^{-3}$ – $10^4$  rad/óra intenzitás, illetve a 0,025 eV – 20 MeV energiatartományba eső neutronok testszövet dózisintenzitását mérő módszerek ismertetése. A jelzett energiahatárokat az általában használt neutronforrások (radioaktív neutronforrások, kritikus rendszerek, neutrongenerátorok) energiaspektruma szabja meg.

I. TÁBLÁZAT  
Különféle közegek összetétele [1], [2]

Anyag	Súlyszázalék						
	H	C	N	O	P	S	Ca
„standard ember” <sup>1</sup> . . . . .	10	18	3	65	1	0,25	1,5
lágú testszövet <sup>1</sup> . . . . .	10	12	4	73	0,2	0,2	0,01
testekvivalens <sup>2</sup> műanyag . . . . .	10	86	4	—	—	—	—
testekvivalens <sup>3</sup> gáz . . . . .	10	45	4	41	—	—	—
etilén . . . . .	14,4	85,6	—	—	—	—	—

<sup>1</sup> Számításoknál csak az oxigént, hidrogént, nitrogént és szenet szokás figyelembe venni.

<sup>2</sup> D. E. Lea nyomán [3].

<sup>3</sup> Gázkeverék; 64% CH<sub>4</sub>, 32,4% CO<sub>2</sub>, 3,6% N<sub>2</sub> (mol-százalék).

A doziméterek egy további — gyakorlati — szempont alapján két csoportba oszthatók. Az egyik csoport detektorból és a detektor jeleit feldolgozó műszerből áll: intenzitást\* mérnek a mérés folyamatos, természetes alkalmazási területük dózistérképek felvétele, folyamatos ellenőrzés és hasonlóak. Ilyenek pl. az ionizációs kamra — elektrométer, vagy a proporcionális számláló — scaler (vagy ratemeter) összeállítások. A másik csoportba tartozó detektorok valamely időtartam alatt érkező összes dózist mérnek\*\*, az információt tárolják, ami azután külön egységet képező kiértékelővel „olvasható ki”. Ebbe a kategóriába tartozik a filmdoziméter, a magfizikai emulzió, az aktivációs detektorok, stb. Leginkább személyi doziméterként használatosak. A következőkben főleg az első csoportba tartozó eszközökkel foglalkozunk.

Mielőtt rátérünk a detektorok tárgyalására, röviden foglalkozunk a neutron-sugárzás és a testszövet kölcsönhatásával is. Ennek ismeretében lehet ugyanis meghatározni, hogy milyen tulajdonságokkal kell rendelkezniük a neutront dózis-detektoroknak.

\* Pl. dózisintenzitást, vagy fluxust, a szerint, hogy a detektor érzékenysége dózistra vagy fluxusra egyenletes-e.

\*\* Illetve, ha a detektor érzékenysége nem dózistra egyenletes, hanem fluxusra, akkor integrál fluxust, stb. A továbbiakban ezzel a kérdéssel részletesen foglalkozunk.



## 1. Neutronsugárzás és testszövet kölcsönhatása

A neutronok valamely közegnek rugalmas ütközés és magreakció útján adhatnak át energiát. Testszövet esetében — az előző részben körülhatárolt energiatartományban — a legfontosabb kölcsönhatások a következők:

Gyors neutronoknál döntő szerepe van a *rugalmas szórásnak*. Mivel rugalmas ütközésnél az  $M$  atomsúlyú magnak átadott energia átlagosan

$$\Delta E = E_n \frac{2M}{(M+1)^2}, \quad (1)$$

másrészt pedig a testszövetben hidrogén atomok vannak túlsúlyban, azért a gyors neutronok energiájuk legnagyobb részét protonoknak adják át. Míg az  $E_n$  energiájú neutronok által meglökött protonok átlagenergia nyeresége (1) szerint  $E_n/2$ , addig a szénatomoké  $0,16 E_n$ , az oxigén atomoké pedig csak  $0,11 E_n$ .

A kicsi (a neutronok szabad úthosszához képest kicsi) térfogatelemnek átadott  $D$  dózis egyszerűen meghatározható [2]:

$$D(\text{rad/n cm}^2) = 1,6 \cdot 10^{-8} E_n \sum_j \frac{2M_j}{(M_j+1)^2} N_j \sigma_j(E), \quad (2)$$

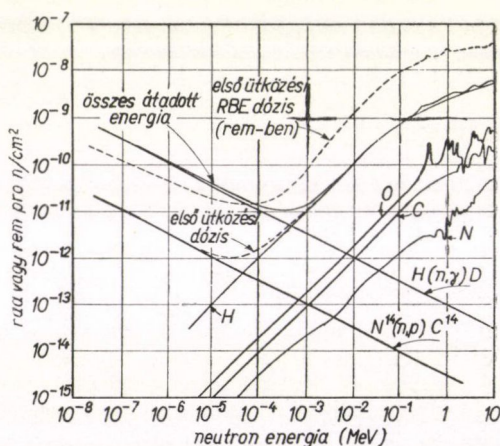
ahol  $M_j$  a  $j$ -ik fajta atom atomsúlya,

$N_j$  a  $j$ -ik fajta atomok száma grammonként,

$\sigma_j(E)$  a  $j$ -ik fajta atom rugalmas neutronszerzési hatáskeresztmetszete,  $\text{cm}^2$ -ben.

Sokkal bonyolultabb a nagyobb testekben elnyelt dózis meghatározása. Ezeknél a többszörös ütközések miatt a dózis jelentősen meghaladhatja az egyszeres ütközési

I. ábra. Lágyszövet első ütközési dózisa. A  $H(n, \gamma)D$  reakció  $\gamma$ -sugarainak kis abszorpciója miatt az első ütközési dózis az összes átadott energiánál kevesebb. Az első ütközési dózis ui. az energiaátadás helyének közvetlen környezetében elnyelődött energiát jelenti. Ez a nehéz ionizáló részecskéktől származik, úgymint a meglökött hidrogén, oxigén, szén és nitrogén magoktól (H, O, C, és N görbék), továbbá a  $N^{14}(n, p)C^{14}$  reakció protonjaitól. Az RBE dózisgörbe az első ütközési dózis-görbéből kapható, a megfelelő RBE értékekkel való szorzással (3. táblázat). Az ordináta itt nem rad, hanem rem.



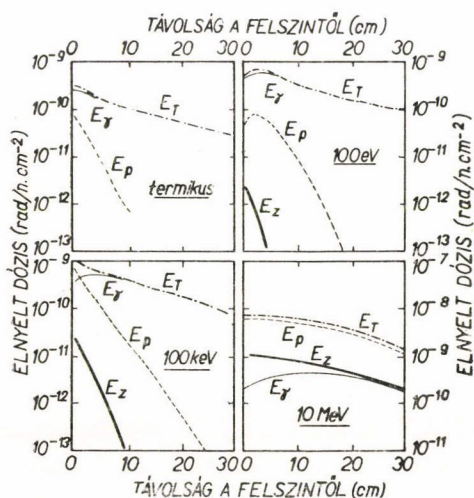
dózsát. A számítások hosszadalmasak és rendszerint csak közelítő jellegűek. (Általában Monte-Carlo módszert szoktak használni). Tájékoztató adat: konvex test felszínén, vagy a felszín közelében a gyors neutron dózis nem éri el az egyszeres ütközési dózis kétszeresét.

A termikusától kev-ig terjedő energiatartományban a neutronok energiájuk nagy részét *magreakciók* útján adják át [4], [5]. Testszövetnél legfontosabb a  $H^1(n, \gamma)D^2$



és az  $N^{14}(n,p)C^{14}$  folyamat (l. 1. ábra). A hidrogén nagy előfordulási aránya, nagy reakció hatáskeresztmetszete, valamint a nagy felszabaduló energia (2,2 MeV) miatt a neutronok energiájuknak zömét az első folyamat útján adják át. A keletkező  $\gamma$  sugárzás nagy áthatoló képessége miatt azonban ez a reakció kis térfogatú testek dóziséhoz alig ad járulékot, ellentétben a nitrogén reakciónál keletkező  $\sim 600$  keV-es protonokkal, amelyek a keletkezésük helyének közvetlen környezetében adják le energiájukat. Nagyméretű testek dóziséánál viszont a hidrogén neutronbefogásának van nagyobb szerepe. [2], [6].

Kiterjedt testek dózisoszlását mutatják a 2a–2d ábrák. Kis neutronenergiáknál az elnyelt dózis a hely szerint erősen változik, nagy energiáknál viszont — a neutronok nagy áthatoló képessége miatt — aránylag állandó.



2. a, b, c, d ábra. 30 cm vastag (két dimenzióban végtelen) testekvivalens réteg mélydózis görbéi.  $E_z$ : nehéz meglökött magok,  $E_p$ : protonok,  $E_\gamma$ :  $\gamma$  kvantumok dózisa,  $E_T$ : teljes dózis

sugárzásokra a rad és rem dózis megegyezik. Másként ez azt is jelenti, hogy a neutronok hatását a jól ismert röntgen sugarakéra vonatkoztatjuk. A fajlagos ionizáció és az RBE összefüggését a 2. táblázat mutatja [9], [10], a különböző neutronener-

Az eddigiekben a testszövet által elnyelt dózissal, a *fizikai dózissal* foglalkoztunk. A neutronok által kiváltott biológiai hatás azonban nem csak az elnyelt dózistól, hanem a neutronenergiától is függ. Mint a különféle sugárzásokkal végzett mérések igazolták, a biológiai hatékonyság az ionizáció sűrűségével arányos. Az ionizáció sűrűséget az egységnyi úthosszon keltett ionpárok számával, a fajlagos ionizációval, vagy az útegységre eső energiavesztéssel; a lineáris energiaátadással (LET: Linear Energy Transfer) szokták jellemezni. Mértékegységként az ionpár/ $\mu$ , illetve a keV/ $\mu$  használatos [7], [8]. A vízben mikrononként 100 ionpárnál kevesebbet keltő sugárzás relatív biológiai hatékonysága (RBE-je, Relative Biological Effectiveness) — definíció szerint — egységnyi. (NB. a vízben és a testszövetben létrehozott ionizációs sűrűség között nincs nagy eltérés.) Ilyen módon elektronokra, 200 keV-nél nagyobb energiájú röntgen- és gamma-sugarakra egyes RBE érték adódik, és így ezekre a

## II. TÁBLÁZAT

Fajlagos ionizáció — relatív biológiai hatásosság összefüggés

Fajlagos ionizáció, ionpár/ $\mu$ víz	RBE	LET, keV/ $\mu$ víz
100 vagy kevesebb	1	3,5 vagy kevesebb
100 — 200	1 — 2	3,5 — 7
200 — 650	2 — 5	7 — 23
650 — 1500	5 — 10	23 — 53
1500 — 5000	10 — 20	53 — 175



giákhoz tartozó RBE-t pedig a 3. táblázat.\* Ez a táblázat jól rávilágít az RBE fontosságára: azonos fizikai dózissnál a biológiai hatás — a neutronenergiától függően — ötszörös határ között is változhat. Az RBE-nek a fajlagos ionizáció útján történő mérésére speciális ionizációs kamrát is szerkesztettek [11].

## 2. Közvetett dózismeghatározás, fluxus- és spektrumméréssel

A neutronfluxus és spektrum ismeretében a dózisintenzitás egyértelműen meghatározható. Ezen az elven tehát a dózisintenzitást közvetve határozzuk meg. A fluxus viszonylag egyszerűen és pontosan mérhető, a neutronok energiáját azonban egyszerű eszközökkel (dozimetriai célra csak ilyenek jöhetnek számításba) nehéz megmérni, ezért meg kell elégednünk átlagenergia meghatározással, vagy tájékoztató jellegű, közelítő spektrumméréssel. Két különböző módszert dolgoztak ki, úgymint a neutron lassítás technikáját és a küszöbdetektoros mérést.

### 2.1. Neutron átlagenergia mérés moderátorral, a termalizálódott neutronok eloszlásának meghatározása útján

Ha lassító közegre gyorsneutron nyaláb esik, a neutronok a moderátorban termalizálódnak, a termikus neutronok hely szerinti eloszlása pedig a közegben elhelyezett detektorokkal kimérhető. A termikus neutronok eloszlása maximummal bíró görbe, mely a maximum környezetében Gauss-görbével, nagyobb moderátor mélységeknél pedig exponenciálissal közelíthető. A maximum helyének a moderátor felületétől mért távolsága, valamint az exponenciális szakasz meredeksége a neutronenergiára jellemző. A termikus neutronok hely szerinti eloszlásának felvételével az átlagenergia, a detektor abszolút érzékenysége meghatározásával pedig a fluxus is meghatározható, és ezeknek alapján a dózisintenzitás kiszámítható.

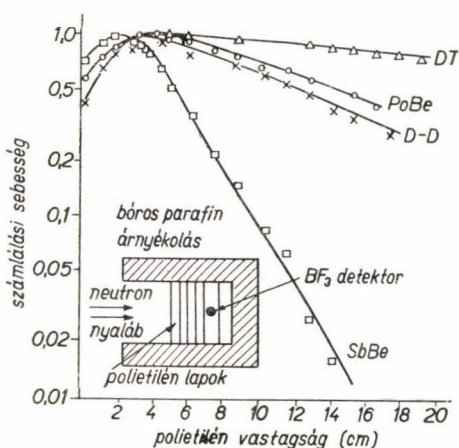
Oleson 18 cm átmérőjű parafin korongokból összeállított moderátor tömbben indium fóliákat helyezett el [12], [13]. Az indium nagy aktivációs hatáskeresztmetszete és rövid felezési ideje ( $150 \cdot 10^{-24}$  cm<sup>2</sup>, ill. 55 perc) miatt érzékeny detektor. A fóliák aktivitáseloszlása viszont — éppen a nagy neutronabszorpció következtében fellépő fluxusdepresszió miatt — nem a moderátoranyagra számított fluxuseloszlást adja. Az eloszlásgörbéknek különböző energiájú neutronforrásokkal való felvételével történő kalibrálásnál azonban ez nem okoz zavart.

\* A sugárvédelemben használt RBE nem azonos a sugárbiológiában használttal. A különféle, sugárzás által kiváltott hatásokra az RBE erősen eltérő, védelmi problémáknál viszont mindig a legérzékenyebb effektust kell figyelembe vennünk. Újabban javasolták a „sugárvédelmi RBE” helyett a QF (=quality factor) jelölést, ami csak elnevezésbeli változás, de célszerű a konfúzió elkerülése miatt.

III. TÁBLÁZAT  
Relatív biológiai hatásosság — neutron energia összefüggés

Neutron energia	RBE
termikus	3
100 eV	2
5 keV	2,5
20 keV	5
100 keV	8
500 keV	10
1 MeV	10,5
2,5 MeV	8
5 MeV	7
7,5 MeV	7
10 MeV	6,5



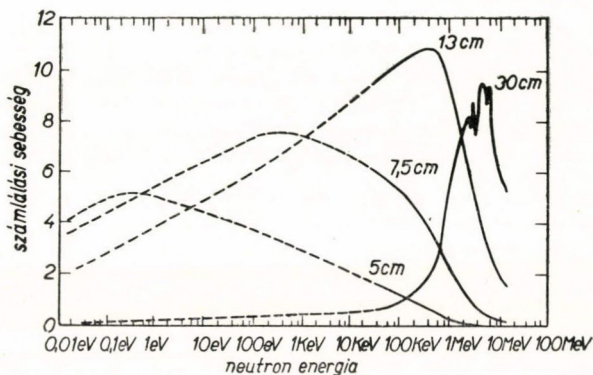


3. ábra. Block és Shon neutron átlag-energia mérőjével felvett eloszlási görbék. Neutron energiák: D-T: 14,5 MeV, Po-Be: 4,9 MeV (átlag), D-D: 2,5 MeV, Sb-Be: 35 keV (átlag)

Kényelmesebben használható *Block* és *Shon* berendezése [14]. Bóros parafin árnyékoló hengerben levő  $\text{BF}_3$  gáz töltésű proporcionális számláló elé változó vastagságú polietilén korongok helyezhetők. A detektort a neutronforrásra irányítva különböző polietilén rétegvastagságoknál mérjük a számlálási sebességet. A detektor vázlata, valamint különböző energiájú neutronforrásokkal felvett görbék láthatók a 3. ábrán. A neutron eloszlásokból hitelesítési görbe szerkeszthető, a maximum helye, vagy a leszálló ág meredeksége és a neutronenergia összefüggésének ábrázolásával. Ha a mérendő spektrumnak termikus összetevője is van, a gyors/termikus fluxus arány függvényében változik a maximum helye, ezért a kiértékeléshez az exponenciális szakasz meredekségét kell figyelembe venni, vagy kadmium borítással ki kell szűrni a termikus neutronokat.

## 2.2. Neutronenergia mérés moderátor gömbökkel

Termikus neutron szcintillátor köré különféle sugarú moderátor gömböket helyezve, az egy meghatározott neutronspektrum által kiváltott számlálási sebesség általában más-más lesz. Kis neutronenergiáknál a gömb sugarának növekedésével a detektor hatásfoka a neutronok fokozódó abszorpciója és visszaszórása miatt csökken. Nagyobb energiájú neutronok kis gömbben csak kevésbé lassulnak le, ezért a detektálási hatásfok a sugár növelésével eleinte nő, majd maximum elérése után csökken. Minden energiához található olyan sugár, amelynél a hatásfok maximális. Különböző gömbökkel mért számlálási sebességek hányadosát képezve a neutronenergia meghatározható. (4. ábra).



4. ábra. Különböző méretű parafin gömbökkel körülvevett termikus neutron szcintillátorok érzékenységének energiafüggése. A gyors tartományban és termikus energián az érzékenységet mérték (—). Az intermedier tartományban a görbét számítás és részben neutron sebesség szelektors relatív mérés útján kapták (---).



Ez a módszer főleg akkor nyújt jó eredményt, ha a neutronspektrum elég „sima”. Kevésbé használható pl. két, erősen eltérő energiájú neutroncsoport esetében. Nagyon érzékeny a módszer, ha tudjuk, hogy milyen spektrum várható, és ezt kívánjuk ellenőrizni, illetve ha több lehetséges energiaeloszlás között kell választanunk. Így sikerült pl. eldönteni, hogy a  $\text{Rh}^{103}(p, n) \text{Pd}^{103}$  reakciónál kilépő neutronok energiaeloszlása nem  $E^{1/2} \exp(-E/\theta)$  alakú (Maxwell spektrum), hanem  $E \exp(-E/\tau)$  párolgási spektrum. [15]. A mérésből a  $\tau$  paramétert néhány százalékos pontossággal meg lehetett határozni. Jó eredményeket kaptak munkahelyek szórt sugárzásának mérésénél és sugárvédő falak vizsgálatánál is [15].

Hankins sugárvédelmi mérésekhez 5 cm, 7,5 cm és 20 cm átmérőjű gömböket, valamint csupasz és kadmiummal burkolt termikus neutron detektort használt [16], [17], [18]. Ezzel az 5 méréssel a neutronspektrum termikus, intermedier és gyors hányadát, valamint a gyors csoport átlagenergiáját határozta meg.

### 2.3. De Pangher kettős moderátoros dozimétere

De Pangher bórt trifluorid töltésű proporcionális számláló energiafüggését mérte a moderátorvastagság függvényében. Azt találta, hogy a 0,1–5 MeV energiatartományban 6 cm moderátorvastagság adja a „fluxusra legegyszerűsebb” érzékenységet, 11,5 cm réteggel lehet a „legegyszerűsebb” dózisérzékenységet elérni. A két „optimális” moderátorvastagság a detektorra húzott egy, ill. két parafin hengerrel érhető el. A megfelelő számlálási sebességekből a neutronfluxus, és dózisintenzitás, hánycsukból az átlagos neutronenergia meghatározható [19].

### 2.4. Neutronspektrum mérés küszöbdetektorokkal

Megfelelően kiválasztott aktivációs küszöbdetektorokkal a neutronspektrum különböző energiájú csoportokra bontható. A keletkezett aktivitások mérésével, a hatáskeresztmetszetek ismeretében, az egyes csoportokhoz tartozó fluxus is meghatározható. A számításba jövő küszöbreakciók hatáskeresztmetszete általában kicsi, ezért ez a mérés inkább csak néhány rad-nál nagyobb dózisok kimutatására alkalmas. A dózismérés érzékenysége természetesen nagymértékben függ az aktivitásméréshez használt számláló hatásfokától, ezért érzékeny és alacsonyhatárú detektorokat célszerű használni.

A küszöbdetektorként használható anyagok  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$ , ritkán  $(n, 2n)$  vagy hasadási küszöbreakció útján aktiválódnak.

IV. TÁBLÁZAT  
Néhány, neutronspektrum mérésre használható  
küszöbreakció

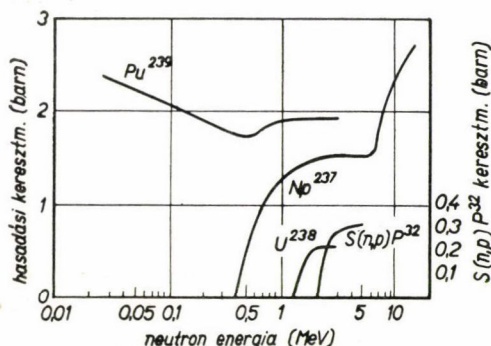
Rekció	Effektív küszöb* (MeV)	Effektív hatáskeresztmetszet* (barn)
$\text{Np}^{237}$ (hasadás)	0,75	1,52
$\text{U}^{238}$ (hasadás)	1,45	0,55
$\text{Th}^{232}$ (hasadás)	1,75	0,15
$\text{P}^{31}(n, p) \text{Si}^{31}$	2,5	0,08
$\text{S}^{32}(n, p) \text{P}^{32}$	2,9	0,30
$\text{Al}^{27}(n, p) \text{Mg}^{27}$	5,3	0,08
$\text{Ni}^{58}(n, p) \text{Co}^{58}$	5,0	1,23
$\text{Si}^{28}(n, p) \text{Al}^{28}$	6,1	0,19
$\text{Mg}^{24}(n, p) \text{Na}^{24}$	6,3	0,05
$\text{Al}^{27}(n, \alpha) \text{Na}^{24}$	8,1	0,11

\*  $1/E$  spektrumra.

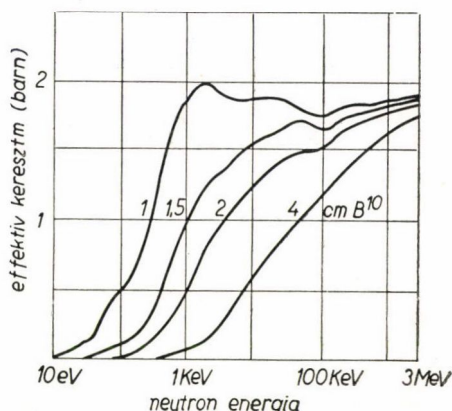


Az utóbbi esetben a keletkezett hasadványok aktivitását mérjük. A hasadási detektorok maguk is radioaktívak, de  $\alpha$ ,  $\beta$ , vagy kisenergiás  $\gamma$  sugárzásuk a hasadványok nagyenergiájú  $\gamma$  sugárzásától elválasztható. A gyakrabban használt küszöbreakciókról ad áttekintést a IV. táblázat [20].

Néhány gyors fluxust mérő küszöbdetektor hatáskeresztmetszete látható az 5. ábrán. [21], [22], [23]. A plutonium önmagában nem küszöbdetektor, de  $B^{10}$  réteggel burkolva kisenergiás érzékenysége gyakorlatilag zérusra csökkenthető (l. a 6. ábrát).



5. ábra. Néhány küszöbdetektor hatáskeresztmetszetének energiafüggése



6. ábra. A  $Pu^{239}$  effektív küszöb-energiájának változása a  $B^{10}$  burkolat vastagságának függvényében

Az Oak Ridge-i laboratórium összeállításánál az arany és kadmiumba csomagolt arany a termikus, az 1 cm  $B^{10}$ -zel burkolt  $Pu^{239}$  az 1 keV fölötti, a  $Np^{237}$ ,  $U^{238}$  és  $S^{32}$  a 0,75 MeV, 1,5 MeV és 2,5 MeV fölötti fluxust méri. A fóliák abszolút aktivitásából az  $N_T$  termikus, valamint az  $N_{Pu}$ ,  $N_{Np}$ ,  $N_U$ , és  $N_S$  (a megfelelő küszöbknél nagyobb energiájú) fluxusokat meghatározva a dózis a

$$D = 10^{-9} [0,026 N_T + 1,0 (N_{Pu} - N_{Np}) + 2,4 (N_{Np} - N_U) + 3,0 (N_U - N_S) + 3,7 N_S] \quad (3)$$

összefüggésből számítható. Ha a fluxusokat  $n/cm^2$  egységben mérjük, a dózis rad-ban adódik.

### 3. Dózismérés testekvivalens detektorral

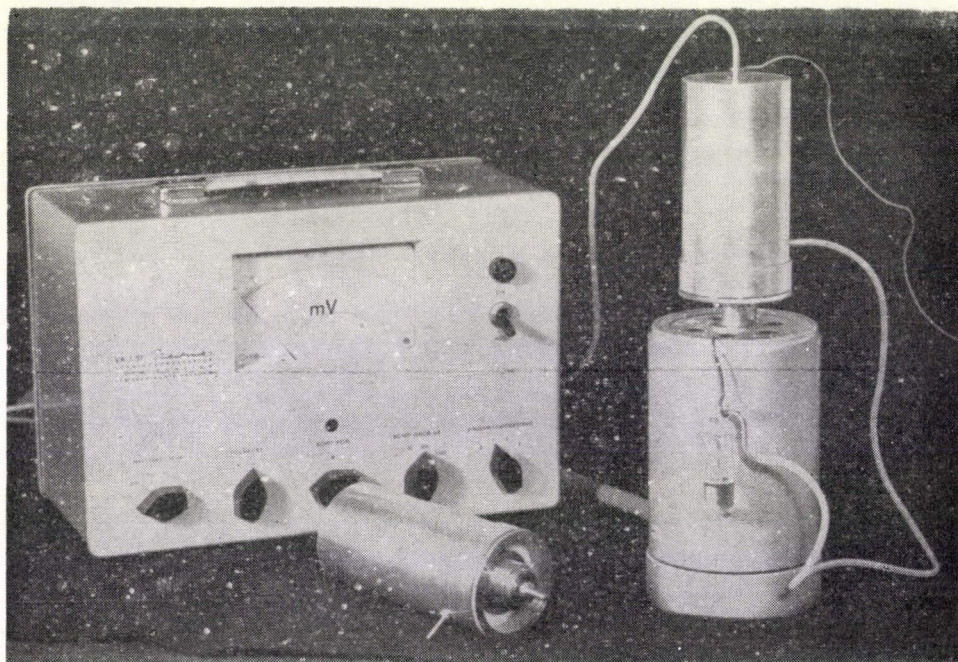
#### 3.1. Testekvivalens ionizációs kamra

Valamely közegben kialakított kicsiny gáztöltésű üreg ionizációja a közegben elnyelt dózissal arányos (Bragg—Gray elv, l. pl. [24], [25]). Testekvivalens közeggel ilyenképpen szövetdózis mérhető. A kisméretű (az ionizáló részecskék hatótávolságánál sokkal kisebb) üreg mérés technikai nehézségek miatt (kis dózisintenzitásoknál kis áramot ad) célszerűtlen. Ha viszont a fal és a gáz azonos atomi összetételű, akkor a méretkorlátozás elesik („homogén kamra”) [26], [27]. Szigorúan testekvivalens és mechanikai szempontból is megfelelő anyagot több szerző is leír [28], [29].



A neutronsugárzást mindig több-kevesebb  $\gamma$  sugárzás kíséri, ilyen „kevert” sugárzásnál a testekvivalens kamra az együttes neutron és  $\gamma$  dózist méri. A kétféle sugárzás eltérő biológiai hatásossága miatt azonban ez az információ nem elegendő: a neutron és gamma dózist külön is ismerni kell. Ez egy második, a neutronsugárzásra nem (illetve kevésbé) érzékeny kamrával oldható meg. Ennek a kompenzáló „gamma-kamrának” a „neutron-kamrával” azonos energiafüggést kellene mutatnia mindkét sugárzásra. Mivel az utóbbi neutron és  $\gamma$  sugárzásra is testekvivalens, a „gamma-kamrának” is ilyennek kellene lennie, úgy, hogy a neutron érzékenysége abszolút értékben kicsi legyen. Ez utóbbi feltétel miatt a kamra hidrogént nem tartalmazhat, ekkor viszont nem készíthető pontosan testekvivalensre. Pontos kompenzálást így nem lehet elérni, sőt számítási és mérés technikai nehézségek miatt a „gamma-kamra” neutron érzékenységet sem lehet a kellő pontossággal meghatározni. Ennek következtében a neutrondózis mérés pontossága erősen függ a neutron/ $\gamma$  dózisintenzitás viszonytól. Kis  $\gamma$  háttérnél néhány százalékos pontosság is elérhető, míg a neutronintenzitást sokszorosan meghaladó  $\gamma$  intenzitásnál a hiba 100%-ot is elérhet [1].

A sokféle „gamma-kamra” anyag közül az alumínium rendszáma nagyobb a testszövetnél, ezért  $\gamma$ -sugárzásra az érzékenysége 100 keV körül tulságosan nagy. Neutron érzékenysége is erősen megnő 5–10 MeV körül, az  $(n, p)$  és  $(n, \alpha)$  küszöb-reakciók miatt. Mindkét szempontból jobb a magnézium [30], [31]. Még előnyösebb



7. ábra. 180 cm<sup>3</sup> térfogatú, etilén töltésű polietilén falú és argon töltésű alumínium ionizációs kamra. A gáz acélpalackból nyomáscsökkentő szelepen keresztül áramlik a kamrába és folyadékzárón keresztül távozik. A Vakutronik elektrométer alsó méréshatára 10<sup>-2</sup> pA, ez ~ 0,4 mrad/órának felel meg



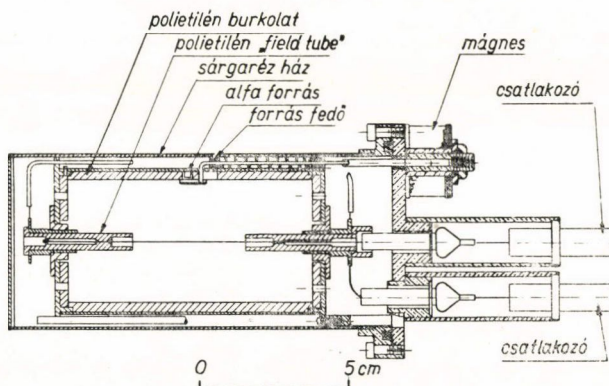
anyag a grafit, de mechanikai tulajdonságai kedvezőtlenek. Nehezen hozzáférhető a deuterizált polietilén [32]. Az egyik legjobban bevált anyag a teflon (politetrafluor-etilén) [33]. Töltőgáznak levegő, argon, vagy  $\text{CO}_2$  használható.

Pontosan testekvivalens kamrát készíteni elég nehéz, mert a falat műanyagkeverékből kell előállítani és gázkeverékkel kell tölteni (l. pl. az I. táblázat adatait). E helyett inkább polistírol és acetilén, vagy etiléngáz — polietilén összeállítást használnak. Az utóbbi összetétel homogén kamrát ad, és a polietiléndózis energiafüggése is jó közelítéssel megegyezik a testszövetével, csak abszolút értéke kb. 40%-kal nagyobb [33] [34]. Ha a kamrafal nem vezető anyag, vékony grafit vagy alumínium réteggel kell bevonni.

Az ionizációs kamra alsó méréshatárát az elektrométer érzékenysége szabja meg, néhány száz  $\text{cm}^3$  térfogatú kamrával 1 mrad/óra körüli dózisintenzitás mérhető. Nagy dózisintenzitásoknál ( $10^4$  rad/óra) nehéz telítési áramot elérni, ebből adódik a felső korlát. Egy, a KFKI-ben használt,  $180 \text{ cm}^3$  térfogatú kamrapár fényképe látható a 7. ábrán.

### 3.2. Hurst-féle proporcionális számláló

Az ionizációs kamrának az a hátránya, hogy a neutron és  $\gamma$  dózis összegét méri, gázerősítés segítségével kiküszöbölhető. Nem túlságosan nagyméretű proporcionális számlálóban a neutronok által meglökött protonok átlagosan sokkal nagyobb impulzust hoznak létre, mint a  $\gamma$  kvantumok által kiváltott elektronok, és így a neutron és  $\gamma$  jelek szétválaszthatók. A neutronimpulzusok megszámlálása — lévén a dózis impulzusszám-szor energia jellegű mennyiség — nem vezet célra, ha-



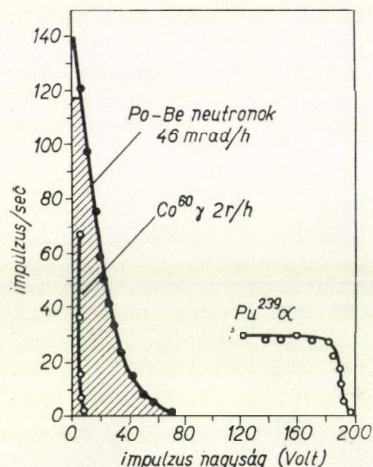
8. ábra. Hurst-féle proporcionális számláló metszete

nem minden egyes impulzus amplitúdóját is meg kell mérni, és az amplitúdókat kell összegezni. A neutrondózis a spektrum területével lesz arányos. Az impulzusamplitúdó — neutronenergia átszámításhoz ismerni kell a cső gázerősítését. Ezt Hurst a következő módon határozta meg [35], [36], [37]: A polietilén falú, etilén töltésű számlálóső oldalába fűrt kis nyílás mögött levő  $\text{Pu}^{239}$  forrás  $\alpha$  részecskéi a nyílást elzáró fedél elmozdítása után a gáztérbe jutnak (l. 8. ábra). Az ismert  $\alpha$  energiával (5,14 MeV) az impulzusamplitúdó tengely kalibrálható (l. 9. ábra). (Az

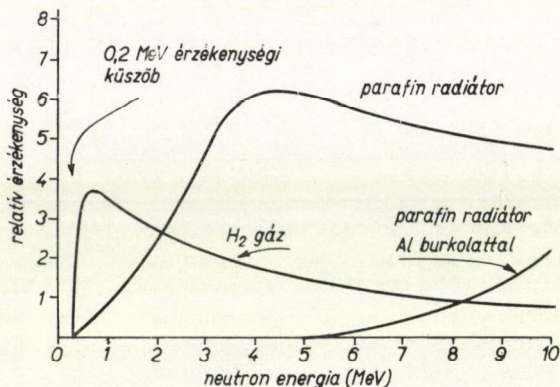


$\alpha$  részek teljes energiájukat a gáztérben adják le). A cső hatásos térfogatát a két elektromos teret határoló „field tube” szabja meg, így az idő és térfogategységenként leadott energia kiszámítható. Meghatározható a gázerősítés úgy is, hogy megmérjük a proporcionális üzemmódban, valamint impulzus ionizációs kamraként működő cső impulzus-amplitúdójának viszonyát [38].

Egyszerűbb kivitelű, hitelesítő forrás és „field tube” nélküli csövek is jól használhatók, csak ezeket időnként neutronforrással hitelesíteni kell. A Hurst-számláló az egyik legelterjedtebb gyors neutron dózismérő [39], [40], [41].



9. ábra. Hurst-csővel felvett integrális impulzusamplitúdó spektrumok



10. ábra. Protonradiátoros proporcionális számláló méretezéséhez használt görbék. A radiátor fóliák adatai: 13 mg/cm<sup>2</sup> és 100 mg/cm<sup>2</sup>, 30 mg/cm<sup>2</sup> alumíniummal fedve

#### 4. A szövetdózis görbét közelítő karakterisztikájú dózismérők

Az ionizációs kamra és a Hurst-féle proporcionális számláló a testszövethez hasonló atomi összetételű anyagból készül, és így utánozza a testszövet energiaelnyelését. Ezekon kívül kifejlesztettek egészen más elven működő dózisdetektorokat is. Ezek nem ionizációmérésen, hanem részecskeszámláláson alapulnak, de számlálási sebességük energiafüggése megközelíti a szövetdózis energiafüggését. A feladat olyan fizikai rendszert találni, amelynek matematikai modelljét sikerül megalkotni, és elég szabad paramétere van ahhoz, hogy az érzékenységet a megkívánt alakúra tudjuk idomítani. A közelítendő görbe az első ütközési, többszörös ütközési, vagy az RBE dózisgörbe is lehet. Az egyik első ilyen próbálkozás 1951-ből származik Hursttól és munkatársaitól [42].

##### 4.1. Protonradiátoros proporcionális számláló

Tekintsünk egy proton radiátorral (vékony parafin réteggel) ellátott proporcionális számlálót. Ha a gáztöltésnek a neutronok csak elhanyagolható energiát adnak át, akkor a cső számlálási sebességének neutronenergia függése a 10. ábra



„parafin radiátor” görbéje szerint alakul. Ez az első ütközési dóziszgörbének a kis és nagyenergiás részen egyaránt alatta marad. Hidrogén tartalmú gáztöltéssel a kisenergiás érzékenység növelhető. A nagyenergiás érzékenységet egy második, alumínium abszorbenssel fedett, radiátorral lehet megemelni. Ez a radiátor csak annál a neutronenergiánál „szól bele” a cső működésébe, amelyhez tartozó, alumíniumban mért, maximális proton-hatótávolság nagyobb az Al réteg vastagságánál. Így a megfelelő görbe kezdetét az Al abszorbenssel, abszolút értékét pedig a radiátor felületével lehet változtatni. Megfelelő paraméterekkel elérhető, hogy a dóziszgörbe közelítésének pontossága 10%-nál jobb legyen.\*

A detektor karakterisztikája kisebb mértékben függ a jeleket számláló scaler érzékenységi küszöbétől is. 0,1–0,2 MeV neutronenergiának megfelelő jeleknél kisebbeket a gamma háttér miatt sem érdemes megszámlálni.

#### 4.2. Neutronlassításon alapuló dózisintenzitás mérők

Termikus neutron detektor lassító közegbe ágyazásával széles energiatartományban egyenletes érzékenység érhető el. Fluxusra állandó érzékenységgű a Hanson — Mc Kibben-féle „long-counter” [43], [44], vagy aránylag konstans érzékenységgű De Pangher „fluxusmérő” detektora. Nem nagyon változik De Pangher „doziméter” összeállításának dózisérzékenysége a 0,1–5 MeV energiatartományban. Valóban dózist mérő detektortól azonban a szövetdózis görbe pontosabb, és nagyobb energiatartományban való reprodukálását kívánjuk meg.

Az utóbbi években több próbálkozás történt olyan, a neutronlassítás elvén alapuló, detektor készítésére, amelynek energiafüggése az RBE szövetdózis görbét közelíti meg. Ezeknek a detektoroknak a kivitele egyszerű, viszont méretezésük elég bonyolult. A számítások hosszadalmasak, (pl. a sokcsoport diffúziós egyenleteket, vagy Monte-Carlo módszert kell használni) és többnyire csak közelítő jellegűek. Ezért fokozottabban kell támaszkodni a mérési eredményekre, viszont az érzékenység energiafüggését mérni nehéz, különösen a keV tartományban.

##### 4.2.1. Anderson és Braun REM számlálója

I. Ö. Anderson és J. Braun  $\text{BF}_3$  töltésű termikus neutron számlálót moderátor réteg — bór abszorbens — moderátor réteg összeállítással vett körül (11. ábra), [45]. Az energiafüggés kiszámítására a következő egyszerű modellt használták: minden, a külső moderátorban ütköző neutron a bór réteg elnyel. Minden, a belső moderátor atomjaival ütköző neutron  $k$  valószínűséggel detektálódik. Ekkor a rendszer megszólalási valószínűsége

$$\eta(E) = k \cdot \exp \{ - \sum(E) d_2 \} [1 - \exp \{ -2 \sum(E) d_1 \}] \quad (4)$$

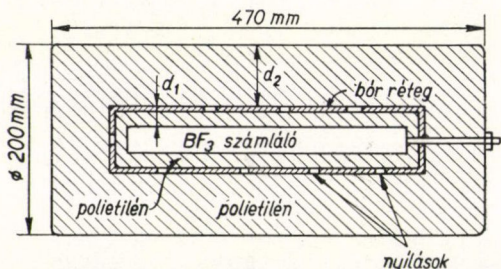
alakban írható, ahol  $\sum(E)$  a moderátor makroszkópikus szórási hatáskeresztmetszete,  $d_1$  és  $d_2$  pedig a belső, illetve a külső réteg vastagsága.

Az  $\eta(E)$  függvényt a  $d_1$  és  $d_2$  paraméterekkel, majd a bemérésnél a bór réteg kifűrésével igazították a REM dózis görbéhez. A számítást, a lyukak szerepét is

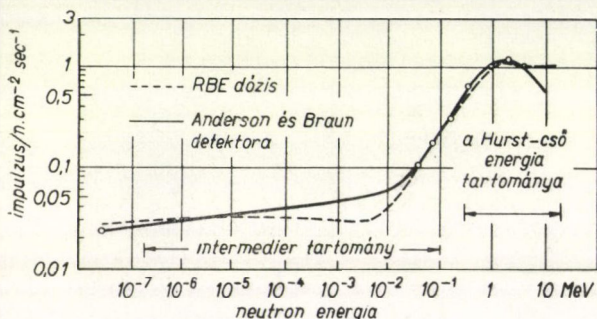
\* 1950 körül — a pontatlanul ismert neutron hatáskeresztmetszetek miatt — a maitól eltérő (5 MeV–10 MeV között konstans) első ütközési dóziszgörbét használtak. Az ismertett detektor méretezésénél is ezt vették alapul.



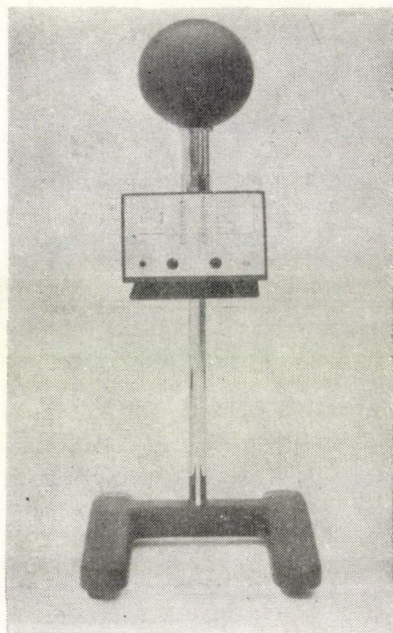
figyelembe vevő, sokcsoport diffúziós módszerrel megismételve a mért  $\eta(E)$ -vel igen jó egyezést kaptak (12. ábra). Végülis  $d_1 = 16$  mm,  $d_2 = 65$  mm moderátor vastagságokkal és a bór burkolat felülete 11,3 százalékanak kifűrésével sikerült a REM dózis görbét 60%-on belül megközelíteni, a termikustól 10 MeV-ig terjedő energiatartományban.



11. ábra. Anderson és Braun REM számlálója



12. ábra. A 11. ábrán látható detektor karakterisztikája



13. ábra. Texas Nuclear Co. gyártmányú moderátor gömbös REM számláló.

A detektorral konstruált hordozható műszer mérési tartománya 0,1–100 mrem/h az újabb kivitel súlya — az előző 15 kg helyett — csak 7,5 kg és érzékenységének irányfüggése 25%-on belül van. 1 mrem/h dózisintenzitásnak 2 imp/sec számlálási sebesség felel meg. A tranzisztoros logaritmusos rate-meter a detektorra van szerelve.

#### 4.2.2. Moderátor gömbös REM számláló

A 2.2-ben tárgyalt moderátorral körülvett termikus neutron detektor érzékenységet, mint a moderátor-átmérő függvényét vizsgálva kitűnik, hogy nagyobb átmérőknél az energiaszűrés hasonló a REM szövetdózis görbéhez. Ezen a felismerésen alapul Hankins REM számlálója [16]. 30 cm átmérőjű polietilén gömb középpontjában  $4 \times 4$  mm-es  $\text{Li}^6\text{J}(\text{Eu})$  termikus neutron szcintillátor helyezkedik el. A kristályhoz plexi fényvezetővel elektronsokszorozó csatlakozik. A detektor termikus energiáktól 15 MeV-ig  $\pm 50\%$  pontossággal közelíti meg a többszörös ütközési RBE szövetdózist (12, 13. ábra). A szcintillációs kristály — kis mérete folytán —  $\gamma$  sugárzásra gyakorlatilag érzéketlen, pl. Ra-Be neutronforrás mérésénél a  $\gamma$  háttér az



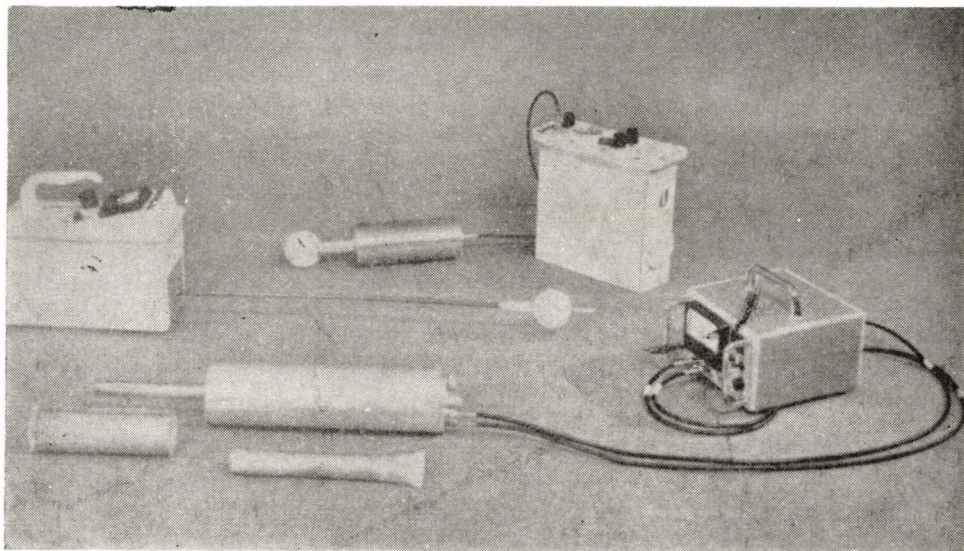
$1:3 \cdot 10^4$  neutron/ $\gamma$  kvantum arány ellenére sem zavar. Neutronérzékenysége, a nagy méret következtében, igen nagy, kb. 3000 imp/mrem.

Széles energiatartománya, egyszerű kezelése és egyéb előnyös tulajdonságai miatt is, ez a műszer az egyik legkényelmesebben használható dózisintenzitásmérő. Nagy előnye, hogy szemben a Hurst-féle számlálóval és más gyors neutron doziméterekkel, — az intermedier neutronokra is érzékeny. (Reaktorok környezetében sok esetben nagyobb lehet az intermedier dózis a gyors neutron dóziséval.)

#### 4.2.3. Intermedier neutrondózis detektor

Részen az intermedier neutronok nagy dozimetriai fontossága miatt, részben pedig azért, mert a gyors energiatartomány mérésére több jól bevált detektor használatos, intermedier neutrondózis mérőt is szerkesztettek [46], [47]. A 6,3 cm átmérőjű parafin gömbbel burkolt bóros cinkszulfid szcintillátor érzékenysége 1 eV és 10 keV között az RBE dóziszgörbét követi, nagyobb energiáknál pedig erősen csökken.

A kis méret következtében könnyű, kényelmesen hordozható ellenőrző műszer is készíthető ezzel a detektorral [48]. A műszer a 14. ábrán, érzékenységének energiafüggése a 15. ábrán látható. Egyéb tulajdonságai hasonlóak a 4.2.2. és 2.2. pontban ismertetett detektorokéhoz.



14. ábra. Basson intermedier neutron detektora (középen). A másik két detektor 6,3 cm átmérőjű polietilén gömbbel, ill. hengerrel burkolt  $\text{BF}_3$  számlálócsővel működik

### 5. Összefoglalás

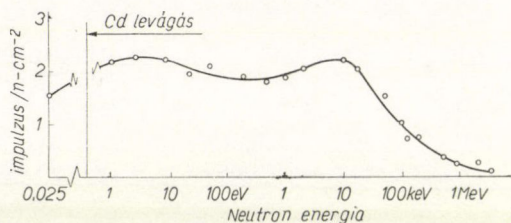
Ha a sokféle neutron dózisintenzitást mérő, illetve közvetett dózismeghatározást lehetővé tevő műszer közül ki akarjuk választani a célunknak megfelelőt, több szempontot kell figyelembe vennünk.



1. *Sugárvédelmi ellenőrzésnél* a könnyű, hordozható, és egyszerűen kezelhető műszerek részesülnek előnyben. A fizikai dózist mérő műszereknél célszerűbbek a biológiai dózis karakterisztikájúak. Az utóbbiaknál — az értékesebb információ érdekében — sokszor engednünk kell a könnyű hordozhatóságból. A Hurst-féle detektor és a különféle moderátoros REM számlálók a legjobb ellenőrző műszerek.

2. *Sugárvédelmi kutatási feladatoknál* már nem ennyire lényeges a gyors és könnyű kezelhetőség, viszont sokszor célszerű a neutronok energiaeioszlását és a különböző energiájú neutronok dózisát külön is meghatározni. Ezért az említett műszereken kívül igen hasznosak a neutronenergiát mérő eszközök is.

3. Az ismertetett detektorok nagy része nem, vagy csak nehezen férhető hozzá. Ha egy laboratórium maga akar ilyeneket előállítani, akkor azt is meg kell vizsgálni, hogy mennyire bonyolult a kérdéses detektor *előállítása* és *bemérése*. Egy-két kivételtől (pl. Hurst-detektor) eltekintve az elkészítés nem nehéz, viszont a bemérés — és éppen az egyszerű és nagyon célszerű REM számlálóknál — hosszadalmas és nagy technikai felkészültséget kíván meg.



15. ábra. A Basson-detektor érzékenysége

A gyors energiatartományban gyorsítókkal létrehozott magreakciókkal lehet monoenergetikus neutronokat előállítani. Pl.  $\sim 100\text{--}600\text{ keV}$  között a  $\text{Li}^7(p, n)\text{Be}^7$  reakció,  $2\text{--}3\text{ MeV}$  körül a  $\text{D}(d, n)\text{He}^3$ ,  $14\text{ MeV}$ -nél a  $\text{D}(t, n)\text{He}^4$  reakciót gyakran használják, de ezeken kívül még számos más reakció útján is állíthatók elő monoenergetikus neutronok [49] [50]. Legnehezebb az  $1\text{ keV}\text{--}100\text{ keV}$  közötti energiatartomány mérése. Néhány gyorsító reakció és radioaktív neutronforrás jöhet szóba, de inkább csak a tartomány nagyobb energiájú részén [49]. Az  $\text{eV}\text{--keV}$  intervallumban repülési idő módszer használható, ami impulzus üzemű reaktort, sebesség szelektort, tehát bonyolult berendezést kíván meg [51]. A termikus érzékenység viszonylag egyszerűen és pontosan mérhető. A legtöbb radioaktív neutronforrás — széles energiaspektruma miatt — az említett módszereknél kevésbé használható.

4. Szólnunk kell még röviden az eddig nem említett detektorokról is.

A *magfizikai emulzió* széles körben használt személyi doziméter. Megfelelő szűrőkkel elérhető, hogy  $0,5$  és  $15\text{ MeV}$  között rad dózist mérjen [52].

Több olyan detektort használnak, amelyeknek energiatartománya egyáltalán nem közelíti meg a testszövetét. Ilyen a gyors neutronokra érzékeny *cinkszulfidos plasztik szcintillátor* [43], [53], [54]. Ez — bár nem tekinthető dózisdetektornak — mégis, (hitelesítés után) ha a neutronspektrum nem változik, dozimetriai ellenőrzésre használható.

A „*termikus neutron detektorok*” a termikus és kisebb mértékben az epitermikus neutronokra érzékenyek. Segítségükkel a termikus neutronok dózisa nagyjából meghatározható, ami azonban — az intermedier dózis alábecslése, vagy figyelmen kívül hagyása miatt — még a gyors dózis mérése mellett is félrevezethető lehet. Ilyenek a kadmiummal borított film és a különféle,  $\text{BF}_3$  gázzal töltött, vagy bór borítású ionizációs kamrák és számlálócsövek, és a termikus neutron szcintillátorok [43], [55], [56]. Az összes eddig tárgyalt detektorról ad áttekintést az V. táblázat.



V. TÁBLÁZAT  
A neutrondózis-mérők áttekintése

Sorszám	Detektor típus	Energiatartomány <sup>1</sup>	Energiafüggés <sup>2</sup>
1	moderátor sorozat	termikus-15 MeV	e, t, RBE
2	moderátor gömbök	termikus-15 MeV	e, t, RBE
3	De Pangher-féle kettős moderátor	0,1 MeV-5 MeV	e
4	aktivációs küszöbdetektorok	termikus-több MeV	e, t, RBE
5	ionizációs kamra	0,1 MeV-15 MeV	e
6	Hurst-féle proporcionális számláló	0,2 MeV-15 MeV	e
7	protonradiátoros proporcionális számláló	0,2 MeV-10 MeV	e
8	moderátor-bor-moderátor REM számláló	termikus-10 MeV	RBE
9	moderátor gömb REM számláló	termikus-15 MeV	RBE
10	kis moderátor gömb	1 eV-10 keV	e
11	film kadmium borítással	termikus	nem
12	magfizikai emulzió	0,5 MeV-15 MeV	e
13	plasztik-ZnS szcintillátor	>0,5 MeV	nem
14	ionizációs kamra, vagy proporcionális számláló B bevonattal, vagy BF <sub>3</sub> töltéssel, bóros termikus neutron szcintillátor	termikus (+intermedier)	nem

<sup>1</sup> Az energiatartomány felső határa azt az energiaértéket jelenti, amely fölött a detektor jelzése már nem arányos a dózisintenzitással.

<sup>2</sup> e: egyszeres ütközési dózis, t: többszörös ütközési dózis, RBE: biológiai dózis, nem: nem dózis karakterisztika. A neutronenergiát és fluxust mérő berendezéseknél (1, 2, 4. pont) természetesen bármelyik dózis meghatározható.

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] Measurement of Absorbed Dose of Neutrons, and of Mixtures of Neutrons and Gamma Rays. NBS Handbook 75.
- [2] Protection Against Neutron Radiation up to 30 Million Electron Volts NBS Handbook 63.
- [3] D. E. Lea: Actions of Radiations on Living Cells. Macmillan and Co., New York, 1947.
- [4] B. J. Moyer: Neutron Physics of Concern to the Biologist. Rad. Res. 1, 10, 1954.
- [5] H. H. Rossi: Neutrons and Mixed Radiations, G. J. Hine és G. L. Brownell: Radiation Dosimetry könyvében, Academic Press, New York, 1956.
- [6] A. G. Istomina, I. B. Keirim—Markus: Maximal zulässige Flüsse mittelschneller Neutronen und ihre Messung. Kernenergie, 3, 1047, 1960.
- [7] J. W. Boag: The Distribution of Linear Energy Transfer or „Ion Density“ for Fast Neutrons in Water. Rad. Res., 1, 323, 1954.
- [8] W. S. Snyder, J. Neufeld: On the Passage of Heavy Particles through Tissue. Rad. Res. 6, 67, 1957.
- [9] Permissible Dose from External Sources of Ionizing Radiation. NBS Handbook 59.
- [10] Radioizotópok sugárzása elleni védelem. MSZ 62-61.
- [11] A. H. Sullivan, J. Baarli: An Ionization Chamber for the Estimation of the Biological Effectiveness of Radiation. CERN 63-17.
- [12] F. B. Oleson: Neutron Monitoring with Indium Foils. BNL 351.
- [13] J. S. Handloser: Health Physics Instrumentation. Pergamon Press 1959.
- [14] S. Block, F. J. Shon: Neutron Dose Measurements by an Attenuation Technique. Health Physics, 8, 533, 1962.
- [15] R. L. Bramblett, R. I. Ewing, T. W. Bonner: A New Type of Neutron Spectrometer. Nucl. Instr. and Methods, 9, 1, 1960.
- [16] D. E. Hankins: A Neutron Monitoring Instrument Having a Response Approximately Proportional to the Dose Rate from Thermal to 7,0 MEV. LA-2717.



- [17] *D. E. Hankins*: New Methods of Neutron Dose Rate Evaluation. Neutron Dosimetry, IAEA Symposium, Harwell, 1962.
- [18] *D. E. Hankins*: Monitoring Intermediate Energy Neutrons. Publikátatlan Los Alamosi jelentés.
- [19] *J. De Pangher*: Double Moderator Neutron Dosimeter. Nucl. Instr. and Methods 5, 61, 1959.
- [20] *J. Moteff, E. R. Beever*: The Status of Threshold and Resonance Neutron Detectors. Selected Topics in Radiation Dosimetry, IAEA Symposium, Vienna, 1961.
- [21] *F. J. Davis*: Neutron Dose Determinations With Threshold Detectors. Selected Topics in Radiation Dosimetry, IAEA Symposium, Vienna, 1961.
- [22] *Hurst, Harter, Hensley, Mills, Slater, Reinhardt*: Techniques of Measuring Neutron Spectra with Threshold Detectors—Tissue Dose Determination Rev. Sci. Instr. 27, 153, 1956.
- [23] *G. S. Hurst*: Mixed Radiation Dosimetry and its Application in Determining the Dose Received by the Japanese at Hiroshima and Nagasaki. IX<sup>th</sup> Internat. Congr. of Radiology, München, 1959.
- [24] *G. N. Whyte*: Measurement of the Bragg-Gray Stopping—Power Correction. Rad. Res. 6, 371, 1957.
- [25] *P. R. J. Burch*: Comment on Recent Cavity Ionization Theories Rad. Res. 6, 79, 1957.
- [26] *G. Failla*: The Flux of Secondary Ionizing Particles in a Uniformly irradiated Homogeneous Medium of Varying Density: Application to Walled Ionization Chambers. Rad. Res. 4, 102, 1956.
- [27] *Bozók L.*: A korszerű dozimetria módszerei és problémái. Fizikai Szemle, 9, 135, 1961.
- [28] *H. H. Rossi, G. Failla*: Tissue—Equivalent Ionization Chambers Nucl. 14, 32, 1956.
- [29] *F. R. Shonka, J. E. Rose, G. Failla*: Conducting Plastic Equivalent to Tissue, Air, and Polystyrene. Second Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, A/Conf. 15 (P) 753.
- [30] *G. J. Neary, F. S. Williamson*: A Simple Method of Fast-Neutron Dosimetry for Use in Radiobiology, and an Intercomparison with Some Methods used in the United States. Selected Topics in Radiation Dosimetry, IAEA Symposium, Vienna, 1961.
- [31] *G. J. Neary, R. J. Munson, R. H. Mole*: Chronic Radiation Hazards, Pergamon Press 1957.
- [32] *E. Bretscher, A. P. French*, British Report 386 (1944).
- [33] *D. C. Lawrence*: Mixed Radiation Dosimetry of a Plutonium—Beryllium Neutron Source. Health Physics, 7, 179, 1962.
- [34] *Makra Zsigmond*: Testekvivalens ionizációs kamrapár gyors neutron dózisintenzitás mérésre. Sugárvédelmi Kollokvium, Budapest, 1963.
- [35] *G. S. Hurst*: An Absolute Tissue Dosimeter for Fast Neutrons The Br. Journal Radiol. 27, 353, 1954.
- [36] *E. B. Wagner, G. S. Hurst*: Advances in the Standard Proportional Counter Method of Fast Neutron Dosimetry. Rev. Sci. Instr. 29, 153, 1958.
- [37] *G. S. Hurst, E. B. Wagner*: Special Counting Techniques in Mixed—Radiation Dosimetry. Selected Topics in Radiation Dosimetry, IAEA Symposium, Vienna, 1961.
- [38] *F. P. Pott, S. Wagner*: Determination of Gamma-Doses in Mixed Rádiation Fields with a Hurst-Type Neutron Dosimeter. Sel. Topics in Rad. Dos. IAEA Symposium, Vienna, 1961.
- [39] *H. Abel*: Vergleichende Untersuchungen zur Dosimetrie schneller Neutronen. Doktorische Arbeit, Berlin.
- [40] *H. Abel, W. Rossbänder*: Streustrahlungsuntersuchungen am Rossendorfer Zyklotron y-120-1. Kernenergie 5, 474, 1962.
- [41] *F. P. Pott, S. Wagner*: Die selektive Messung von Neutronen und Photonendosen mit einem Äthylen-Dosimeter. Nukleonik 2, 271, 1960.
- [42] *G. S. Hurst, R. H. Ritchie, H. N. Wilson*: A Count-Rate Method of Measuring Fast Neutron Tissue Dose. Rev. Sci. Instr. 22, 981, 1951.
- [43] *W. D. Allen*: Neutron Detection. London, Newnes Ltd. 1960.
- [44] *Nobles, Day, Henkel, Jarvis, Kutarnia, McKibben, Perry, Smith*: Response of the Long Counter. Rev. Sci. Instr. 25, 334, 1954.
- [45] *I. Ö. Andersson, J. Braun*: A neutron REM Counter with uniform Sensitivity from 0,025 eV to 10 MeV. Neutron Dosimetry Symposium, Harwell, 1962.
- [46] *J. K. Basson*: A Detector for Intermediate Energy Neutrons. Nucl. Instr. and Meth. 22, 339, 1963.
- [47] *J. K. Basson*: Counting Intermediate-Energy Neutrons. Neutron Dosimetry. Symposium, Harwell, 1962.



- [48] *J. W. Smith*: An Investigation of the Intermediate-Energy Neutron Dose Around Nuclear Installations. Neutron Dosimetry, Symposium, Harwell, 1962.
- [49] *J. B. Marion*: The  $\text{Li}^7/\text{p}$ ,  $\text{n}/\text{Be}^7$  Reaction. J. B. Marion, J. L. Fowler: Fast Neutron Physics, Intersci. Publ. New York, 1960 könyvében.
- [50] *J. Monahan*: Monoenergetic Neutron Sources: Reactions with Light Nuclei. (49)-ben idézett műben.
- [51] *R. Fräki, M. Leimdörfer, S. Malmkog*: The Energy Variation of the Sensitivity of a Polyethylene Moderated  $\text{BF}_3$  Proportional Counter. Nucl. Instr. and Meth. 23, 341, 1963.
- [52] *J. S. Cheka*: Recent Developments in Film Monitoring of Fast Neutrons. Nucleonics, 12, 40, 1954.
- [53] *W. F. Hornyak*: A Fast Neutron Detector. Rev. Sci. Instr. 23, 264. 1952.
- [54] *C. D. Swartz, G. E. Owen*: Recoil Detection in Scintillators. (49)-ben id. műben.
- [55] *K. Becker*: Filmdosimetrie. Springer-Verlag, 1962.
- [56] *Békés Mártonné, Makra Zs.*: Személyi sugárvédelmi ellenőrzés filmdoziméterrel. KFKI Közl. 9, 251, 1961.



# AZ ENTRÓPIANÖVEKEDÉS PROBLÉMÁJÁRÓL \*

HORVÁTH JÁNOS

A József Attila Tudományegyetem Elméleti Fizikai Intézete, Szeged

A molekuláris rendszerek vizsgálatára szolgáló mérőberendezések objektív sajátosságaitól függően, bevezethető az ún. finom- és durvaszemcsés statisztikai sokaságok fogalma, ill. az eme sokaságokat jellemző finom- és durvaszemcsés sűrűségoperátorok. Kimutatható, hogy e két sűrűségoperátor evolúciós törvénye különböző és az evolúciós törvényekből következik, hogy míg a finomszemcsés statisztikai sokaságok entrópiája nem növekszik, addig a durvaszemcsés statisztikai sokaságok entrópiája mindaddig növekszik, míg el nem éri a termodinamikai egyensúlynak megfelelő maximális értéket. *Fajn* vitatja ezt a sokak által elfogadott megállapítást, véleményét azonban nem tarthatjuk elfogadhatónak. Álláspontunk igazolására részint ismertetjük a problémakör idevonatkozó modern irodalmát, részint pedig egy kézenfekvő módon értelmezett durvaszemcsés sűrűségoperátor segítségével megmutatjuk, hogy az entrópiánövekedés valóban nem a „durvaszemcsésítésre”, hanem a sűrűségoperátorok evolúciós törvényére vezethető vissza.

A kvantummechanikai többtest-probléma modern módszereinek a kidolgozása után, amelyek mélyebb bepillantást tettek lehetővé különböző atomfizikai rendszerek törvényszerűségeibe, az utóbbi tíz évben lehetőség nyílt a reális kvantumgázok konzekvens elméletének megalapozására. E problémakört olyan behatóan tárgyalja az utóbbi évek folyóirat-, tankönyv- és monográfiailrodalma, valamint a különböző referáló folyóiratok és a mindinkább elszaporodó nemzetközi nyári iskolák kiadványai, hogy még a legfontosabb munkák felsorolása is igen hosszadalmas lenne. Annak ellenére, hogy magyar nyelven még késik egy összefoglaló munka megjelenése, mely ezeknek az eredményeknek akárcsak az elemeit is ismertetné, a Magyar Fizikai Folyóirat hasábjain az utóbbi években megjelent néhány úttörő munka fordítása, ill. több összefoglaló jellegű referátum, a hazai fizikusok számára is könnyebben hozzáférhetővé teszi számos olyan eredmény és módszer tanulmányozását, amelyek szerves részei a statisztikai mechanikai kutatások új reneszánszának.

Messzire vezetne, ha akár csak vázlatosan is utalni akarnánk az elméleti és gyakorlati szempontból egyaránt fontos eredményekre, ezért most csupán egy problémakört kívánunk kiragadni, amely különösen az utóbbi években került az érdeklődés középpontjába. Ez a problémakör az irreverzibilis folyamatok statisztikai elmélete.

Ismeretes, hogy a klasszikus statisztikai mechanika inkább termodinamikai egyensúlyban levő rendszerek esetében ért el nagyon szép eredményeket. Ugyanakkor az irreverzibilis folyamatok és a relaxációs jelenségek elmélete kevésbé volt kellően megalapozott. Igaz, hogy már korábban is voltak nagyjelentőségű úttörő kezdeményezések és főleg a transzport- és az ergod-elmélet terén elért eredmények

\* Érkezett 1964. ápr. 18.



kapcsolatba hozhatók e problémával, mégis csak az ötvenes években álltak rendelkezésre azok a módszerek, melyek az irreverzibilitás problémájának új elemzését lehetővé tették. A továbbiakban e témakört fogjuk kissé részletesebben tárgyalni és néhány megjegyzést fűzünk ezekhez a vizsgálatokhoz.

### I. §. Néhány előzetes megjegyzés

A fenomenológiai termodinamikában az olyan körfolyamatokat nevezzük irreverzibiliseknek, melyeknél a rendszer környezete nem kerül vissza eredeti állapotába. Valamivel általánosabb és a mi céljainknak jobban megfelelő definíció a következő [1]: *Ha egy termodinamikai rendszer állapota oly módon változik meg, hogy található egy folyamat, mely a közbülső állapotoknak ugyanazon a sorozatán fut le, de időben ellentétes irányban, akkor a folyamatot reverzibilisnek, ha ilyen folyamat nem létezik, akkor irreverzibilisnek nevezzük.*

Tapasztalat szerint a reális termodinamikai folyamatok mindig irreverzibilisek. Ugyanakkor mind a mechanikai, mind pedig a kvantummechanikai folyamatok reverzibilisek, hiszen a dinamikai alapegyenletek és a *Schrödinger*-egyenlet invariánsak a  $t \rightarrow -t$  transzformációval szemben. Alapvető probléma tehát annak a kérdésnek a tisztázása, *hogyan lehetséges az, hogy a reverzibilis mikrofolyamatok összessége végül is irreverzibilis makrofolyamatokra vezet?* A következőképpen is megfogalmazhatjuk ezt a problémát: miben rejlik annak a minőségi változásnak az oka, minek következtében nagyszámú reverzibilis mikrofolyamatból irreverzibilis makrofolyamat válik?

A molekuláris rendszerek általános elmélete keretében ez a probléma konkrétan először a kinetikai gázelméletben a *Boltzmann*-féle *H*-tétellel kapcsolatban, majd a statisztikai mechanikában a híres ergod-hipotézissel kapcsolatban merült fel [2]. A *Loschmidt*-féle visszatérési paradoxonból sokan azt a következtetést vonták le — és ez a felfogás még most is tartja magát —, hogy végső soron, nincsenek irreverzibilis folyamatok és az irreverzibilis folyamatok fogalma csupán közelítő jellegű: akkor beszélünk irreverzibilis folyamatról, amikor a *Poincaré*-féle ciklus időtartama (ami pl. egy mol gáz esetén  $10^{10^{19}}$  évnek felel meg) igen nagy az észlelés időtartamához viszonyítva. Bár a problémának ez a megoldása igen kézenfekvő, nem tarthatjuk teljesen megnyugtatónak és valószínűleg ez az oka annak, hogy ez a kérdés újftt az érdeklődés középpontjába került.

Az újabb vizsgálatok tükrében [3–14]<sup>1</sup> megállapíthatjuk, hogy e probléma szempontjából döntő jelentőségre tett szert *Gibbs* egy észrevétele. Cseppentsünk fekete kávéba egy csepp tejet. Kezdetben a tejrészecskék sűrűségeloszlása rendkívül inhomogén lesz. Idővel azonban (és ezt a folyamatot keveréssel lényegesen meggyorsíthatjuk) az eloszlás teljesen homogénné válik, amint arról a tejeskávé egyenletes színe meggyőzhet bennünket. Vizsgáljuk meg azonban az elegyet olyan mikroszkóppal, melynek segítségével egy igen kis résztérfogatot tehetünk vizsgálat

<sup>1</sup> Itt azokat az összefoglaló műveket soroltuk fel, amelyekhez sikerült hozzájutnunk. Ezekben részletes irodalmi utalások találhatók az eredeti munkákra, amelyek közül a továbbiakban elsősorban az újabbakat, ill. csak a legfontosabbakat fogjuk felsorolni. E művek közül több Nyári Egyetemi előadások gyűjteménye, amelyekre a szerző nevének a megjelölésével és az előadásgyűjtemény, továbbá az előadásának a sorszámaival fogunk hivatkozni. (Pl. *S. Fujita* [14/5], a szerző [14]-ben megjelent „*Approach to Equilibrium of a Many-Particle System*” c. előadására utal.)



tárgyává, akkor azt tapasztaljuk, hogy az egyes ilyen kis résztérfogatokban már távolról sem lesz a tejrészecskék eloszlása homogén. E látszólagos ellentmondás analitikus megfogalmazása céljából bevezette *Gibbs* a *finom-* és *durvaszemcsés statisztikai sokaságok* fogalmát. Ezek közül az első a mikrofizikai, az utóbbi a makrofizikai viszonyoknak felel meg. (Bár az irodalomban ezt nem szokás különösképpen hangsúlyozni, rá kívánunk mutatni arra, hogy ezek a statisztikai sokaságok objektív kategóriák, hiszen a választott mérőműszer objektív sajátossága alapján határolhatók el egymástól, annak ellenére, hogy bizonyos mértékig a megfigyelőtől függ az, hogy milyen műszert használ.) Mármint *Gibbs* és a kutatók többségének véleménye szerint, a finomszemcsés sokaságok keretében lejátszódó folyamatok mindig reverzibilisek és az irreverzibilitás a durvaszemcsés sokaságokra jellemző. *V. M. Fajn* [13], egyébként igen mély eredményeket tartalmazó dolgozatában vitatja, hogy ez lenne a felvetett probléma megoldása. Álláspontját ezért a továbbiakban részletesebben elemezni fogjuk.

A kvantumstatisztikák ergod-elmélete keretében *Neumann János* [15] elevenítette fel *Gibbs* álláspontját. Definíálta a *mikro-* és *makrofizikai dinamikai változók* fogalmát és ennek megfelelően építette ki elméletét, mely az újabb kutatások során centrális szerepet játszik. Most amikor mi a továbbiakban kvantummechanikai rendszerek statisztikai elméletével kívánunk részletesebben foglalkozni, szükséges, hogy *Neumann*-elméletével behatóbban foglalkozzunk.

Legyen szabad rámutatni arra, hogy amikor mi a továbbiakban csak kvantumstatisztikával foglalkozunk, végső soron nem szűkítjük le lényegesen a problémát, mert a klasszikus statisztika fázisvalószínűsége ( $q$ ) és a kvantumstatisztika sűrűségoperátora ( $\mathbf{q}$ ), melyekkel a tekintetbe vett statisztikai sokaságokat jellemezzük, matematikai szempontból ugyanolyan típusú *evolúciós egyenletnek* tesz eleget:

$$i \frac{\partial q}{\partial t} = \mathbf{L}q, \quad (1,1)$$

ahol a klasszikus statisztikában (feltéve, hogy  $q_k$  és  $p_k$  az általános kanonikus koordináták és  $H$  a *Hamilton*-féle függvény):

$$\mathbf{L}q \stackrel{\text{def}}{=} -i \{H, q\} \equiv -i \sum_k \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial q}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial q}{\partial p_k} \right\}, \quad (1,2)$$

tehát (1,1) a *Liouville*-féle egyenlet [2]; és a kvantumstatisztikában (feltéve, hogy  $\mathbf{H}$  a rendszer *Hamilton*-operátora):

$$\mathbf{L}q \stackrel{\text{def}}{=} (1/\hbar)[\mathbf{H}, \mathbf{q}] \equiv (1/\hbar)(\mathbf{H}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{H}), \quad (1,3)$$

tehát (1,1) a *Neumann*-féle egyenlet. Ha mármint az irreverzibilitás problémájával foglalkozunk, amikor a tekintetbe vett rendszer állapotának időbeli változását vizsgáljuk, mindkét esetben pontosan ugyanazzal a problémával találkozunk, hiszen az állapotváltozás ugyanolyan tulajdonságokkal rendelkező unitér transformáció segítségével jellemezhető:

$$q(t) = e^{i\mathbf{L}t} q(0). \quad (1,4)$$

Ez azt jelenti, hogy amennyiben szívesebben gondolkodik valaki a klasszikus sta-



tisztikai mechanika fogalmi körében, akkor a további meggondolások klasszikus megfelelőjét könnyen megtalálhatja.<sup>2</sup>

A fenomenológiai termodinamikában az irreverzibilitással kapcsolatba hozható állapotfüggvény az *entrópia*, melyet az egyensúlyi állapot termodinamikájában, vagy *Guggenheim* terminológiájával élve a termosztatikában, a

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T} \quad (1,5)$$

egyenlettel definiálunk, ahol  $\Delta S$  a rendszer entrópiájának a változása, ha a rendszer  $T$  hőmérsékleten  $\Delta Q$  hőmennyiséget abszorbeál. Ennek az elméletnek a keretében az irreverzibilitás az entrópia egyirányú változásával hozható kapcsolatba.

Termodinamikai egyensúlyban levő rendszerek statisztikai elméletében a rendszer valamely makróállapotának entrópiáját az illető állapot termodinamikai valószínűségével fejezzük ki:

$$S = k \log W = k \log \Delta\omega, \quad (1,6)$$

(*Boltzmann*-féle posztulátum<sup>3</sup>), ahol  $W$  az illető makróállapothoz tartozó mikroállapotok számát, ill.  $\Delta\omega$  az  $(E, E + \Delta E)$  energiatartományhoz tartozó  $\Gamma$ -térbeli fázistérfiguratot jelenti ( $k$  a *Boltzmann*-féle állandó). Ámde akkor adott állapotban minél egyenletesebb a fázispontok eloszlása a  $\Gamma$ -térben, annál nagyobb az entrópia és ugyanakkor annál kevesebb információnk van a rendszer lehetséges mikroállapotairól.

Ügyelnünk kell azonban arra, hogy az entrópiának ez a statisztikai definíciója csak egyensúlyi állapotban konzekvens, amikor valóban minden további nélkül feltehető, hogy a maximális termodinamikai valószínűséghez maximális entrópiaérték tartozik. Tekintettel arra, hogy a termodinamika II. főtétele értelmében zárt rendszerek entrópiája nem csökkenhet és egyensúlyi állapotban az entrópia maximális, *Boltzmann* úgy vélte, hogy az (1,6) alatti entrópiadefiníció általánosítható és kiindulásul szolgálhat nem-egyensúlyi állapotban levő termodinamikai rendszerek statisztikai elméletének a kiépítésénél. Ez a sejtés azonban nem bizonyult konzekvensnek és igen hosszadalmas, valamint kiterjedt vitára szolgáltatott alkalmat. Ezzel kapcsolatban legyen szabad csak annyit megemlítenünk, hogy *Balatoni János* és *Rényi Alfréd* [16] igen meggyőzően rámutattak arra, hogy két függvény maximumának a megegyezéséből még nem következtethetünk a két függvény megegyezésére, következésképpen az a tény, hogy egyensúlyi állapotban (1,6) érvényben van, még nem biztos, hogy nem-egyensúlyi rendszer esetén is feltételezhető az érvényessége.

Az entrópiafogalom tisztázásához lényegesen hozzájárult az információelmélet [17]. E szerint legyen adva egy valószínűségeloszlás, melyet egy statisztikai sokaság segítségével jellemezünk, és az entrópiát definiáljuk oly módon, hogy eleget tegyen az alábbi követelményeknek: *a)* az entrópia legyen a valószínűségeloszlás funkcionálja és valahányszor a sokaság minden eleme egyaránt valószínű, tehát a statisztikai sokaság maximálisan kaotikus, legyen maximális; *b)* valahányszor a sokaság egy speciálisan megadott állapotban van, értéke legyen minimális; *c)* legyen

<sup>2</sup> L. pl. [8/7, 8/8].

<sup>3</sup> E probléma részletesebb elemzése és a vele kapcsolatos kifogásolható álláspontok kritikája megtalálható pl. [2] 240. és 358. oldalán. (További irodalmat l. ott.)



a valószínűség eloszlás additív függvénye, tehát egymással kölcsönhatásban nem levő, statisztikusan független rendszerek entrópiája legyen a részrendszerek entrópiájának összege. E követelményeknek eleget tevő entrópiadefiníció (egy tetszés szerinti additív állandótól eltekintve) a következő:

$$S = -k \sum_i p_i \log p_i, \quad (1,7)$$

ahol  $p_i$  a statisztikai sokaság  $i$ -edik elemének a valószínűsége, amely kielégíti a

$$\sum_i p_i = 1 \quad (1,8)$$

relációt. Megjegyezzük, hogy itt  $i$  a sokaság elemeinek a rögzítésére szolgáló paraméterek (pl. kvantumszámok) összességét jelöli, és lehet diszkrét vagy folytonos (az utóbbi esetben a formuláinkban jelzett összegezés integrálással helyettesítendő).

Ideális gáznál a rendszer  $i$ -edik mikroállapota esetében a molekulák fázispontjai töltsék ki a  $\mu$ -tér  $\omega_i$  térfogatát.

*Mikrokanonikus sokaság* esetén ezek mind a  $\mu$ -térnek az  $(E, E + \Delta E)$  energianívóhoz tartozó  $\Delta\omega$  tartományában vannak, tehát egyetlen molekula fázispontjának a találati valószínűsége  $p_i = 1/\Delta\omega$  és így egyensúlyi állapotban:

$$S = -k \sum_{i \in \Delta\omega} \frac{1}{\Delta\omega} \log \frac{1}{\Delta\omega} = k \log \Delta\omega. \quad (1,9)$$

*Kanonikus sokaság* esetén, ha  $\bar{E}$  az energia átlagértéke, akkor egyensúlyi állapotban  $p(\bar{E}) = \frac{1}{\Delta\omega}$ , tehát (1,7) alapján

$$S = -k \sum_E p(E) \log p(E) = -k \sum_{E \in \Delta\omega} \frac{1}{\Delta\omega} \log \frac{1}{\Delta\omega} = k \log \Delta\omega. \quad (1,10)$$

Láthatjuk tehát, hogy termodinamikai egyensúly esetén az információelméleti entrópiadefiníció megegyezik az entrópia (1,7) alatti *Boltzmann*-féle definíciójával.

Miután a következő paragrafusban a kvantumstatisztikai sokaságokat egyértelműen jellemeztük, be fogjuk látni, hogy az információelméleti entrópiadefiníció lényegesen általánosabb, mint a *Boltzmann*-féle, és valóban lényeges eltérést mutat a finom- és durvaszemcsés sokaságok entrópiájának a viselkedése.

## 2. §. A sűrűségoperátor

Legyen adva  $\mathfrak{N}$  kvantummechanikai rendszer, melyek állapotát a  $\psi^k$  ( $k = 1, 2, \dots, \mathfrak{N}$ ) normált hullámfüggvények segítségével írjuk le.<sup>4</sup> Legyen továbbá  $\{\varphi_n\}$  egy teljes

<sup>4</sup> Az egyszerűség kedvéért spintől és egyéb belső szabadsági fokoktól most eltekintünk, tehát a  $\psi^k$  és  $\varphi_n$  függvények skalár függvények.

Megjegyezzük továbbá, hogy az  $\mathfrak{N}$  rendszernek nem kell szükség szerint megegyeznie. Lehetnek lényegesen különbözők is, és ennek következtében a szabadsági fokaik száma sem egyezik meg (pl. a szilárd test fizikában: elektron- és fononrendszer). Mindazonáltal erre most nem leszünk figyelemmel és a könnyebb áttekinthetőség kedvéért feltételezzük, hogy  $\mathfrak{N}$  azonos felépítésű rendszerről (pl.  $\mathfrak{N}$  részecskéből álló fermion- vagy bozongázzról) van szó.



ortonormált függvényrendszer, akkor  $\psi^k$  sorbafejthető a  $\varphi_n$  függvények szerint:

$$\psi^k = \sum_n c_n^k \varphi_n, \quad \left( c_n^k = \int \varphi_n^* \psi^k dx; k = 1, 2, \dots, \mathfrak{N} \right) \quad (2,1)$$

A  $k$ -adik rendszerben valamely dinamikai mennyiséghez tartozzék az  $\mathbf{A}$  operátor, melynek kvantummechanikai várható értéke:

$$\mathcal{A}_k = \int \psi^{k*} \mathbf{A} \psi^k dx, \quad (2,2)$$

ahol  $x \equiv \{x_1, x_2, \dots, x_f\}$  a kvantummechanikai rendszer általános koordinátáit jelöli, és az integrál az egész konfigurációs térre kiterjesztendő. Ezt a várható értéket mindegyik rendszer esetén kiszámíthatjuk, és ez az egyes rendszerek kvantumállapotától függően más és más lehet. Ha mármost az  $\mathfrak{N}$  rendszerből álló sokaságban vagyunk kíváncsiak a dinamikai mennyiség várható értékére és a  $\psi^k$  állapot megvalósulásának a valószínűsége  $w_k$ , akkor ezt a következőképpen kapjuk:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \sum_{k=1}^{\mathfrak{N}} w_k \mathcal{A}_k = \sum_{k=1}^{\mathfrak{N}} w_k \int \psi^{k*} \mathbf{A} \psi^k dx, \quad \left( \sum_{k=1}^{\mathfrak{N}} w_k = 1 \right), \quad (2,3)$$

ahol a továbbiakban  $\langle \dots \rangle$  a sokaságra vonatkoztatott átlagértéket, az ún. statisztikai várhatóértéket jelenti.

Legyen

$$A_{mn} \equiv \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \equiv \langle \varphi_m | \mathbf{A} | \varphi_n \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int \varphi_m^* \mathbf{A} \varphi_n dx, \quad (2,4)$$

és értelmezzük a

$$\varrho_{nm} \equiv \langle n | \mathbf{Q} | m \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^{\mathfrak{N}} w_k c_m^{k*} c_n^k \quad (2,5)$$

sűrűség-mátrixot, akkor (2,3) a következő alakba írható:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \sum_{m,n} A_{mn} \varrho_{nm} \equiv \sum_{m,n} \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \langle n | \mathbf{Q} | m \rangle = \sum_m \langle m | \mathbf{A} \mathbf{Q} | m \rangle = Sp \{ \mathbf{A} \mathbf{Q} \}, \quad (2,6)$$

ahol  $\mathbf{Q}$  a Neumann-féle sűrűség-operátor, melynek a  $\{\varphi_n\}$  bázisrendszerben  $\varrho_{nm}$  a mátrix-előállítása.

A fenti meggondolásból kitűnik, hogy az  $\mathfrak{N}$  rendszerből álló sokaságra vonatkoztatott várható érték definíciójában — amint arra legvilágosabban *F. London* és *E. Bauer* [18] mutattak rá először 1939-ben — két lényegesen különböző természetű és eredetű valószínűség-számítási meggondolás húzódik meg:

a) Az egyik kvantummechanikai eredetű, és akkor is számolnunk kell vele, ha a tekintetbe vett rendszerről a mikrorendszerek sajátos objektív törvényszerűségeivel összeegyeztethető minden lehetséges információ rendelkezésünkre áll. Ha a  $\{\varphi_n\}$  bázisrendszer elemei a szóban forgó kvantummechanikai rendszer lehetséges energiaállapotaihoz tartozó sajátfüggvények, akkor a  $\{c_n^k\}$  együtthatók összessége — adott körülmények között — egyértelműen meghatározza a rendszer állapotát leíró  $\psi^k$  hullámfüggvényt és  $|c_n^k|^2$  megadja annak a valószínűségét, hogy a  $k$ -adik rendszer  $n$ -edik állapota a lehetséges állapotok szuperpozíciójában milyen valószínűséggel valósul meg. Ha tehát valamilyen speciális, ún. „szűrőberendezéssel” nem gondoskodunk arról, hogy a  $k$ -adik rendszernek csak egyetlen állapota való-



suljon meg,<sup>5</sup> akkor a lehetséges maximális információ — melyhez ún. *maximális mérés* útján jutunk — az együttthatók összegének az ismeretét biztosítja. Ez azonban elegendő ahhoz, hogy (2.2) segítségével bármely dinamikai változó várható értékét meghatározhassuk.

b) Ha lehetőségünk lenne arra, hogy az  $\mathfrak{N}$  rendszerből álló sokaság minden eleme számára azonos körülményeket biztosítsunk, akkor a  $\{c_n^k\}$  együttthatók és ezzel együtt a  $\psi^k$  hullámfüggvények, valamint a  $w_k$  valószínűsések minden  $k$ -ra megegyeznének és a statisztikai várhatóérték megegyeznék a kvantummechanikai várható értékkel. Jóllehet a kvantummechanikai törvények az azonos lehetőségek biztosítását elvileg nem zárják ki, erre a legtöbb esetben gyakorlatilag nincsen lehetőség és a maximális információ e tekintetben az, hogy a lehetséges körülmények a sokaság elemei közt statisztikailag hogyan oszlanak meg. Ismeretes, hogy ezt az információt a sűrűség-operátorral juttatjuk kifejezésre, amelyet ezért sokan *statisztikai operátornak* is neveznek.

A sűrűség-operátor fontosabb tulajdonságait az alábbiakban foglaljuk össze:<sup>6</sup>

(i) A sűrűség-operátor hermitikus operátor, tehát

$$\langle m|\rho|n\rangle = \langle n|\rho|m\rangle^* \quad (2,7)$$

Ámde akkor  $\langle n|\rho|m\rangle$ , ill.  $\rho$  diagonális elemei valósak.

(ii) Minthogy a  $\psi^k$  függvények egységre normáltak

$$Sp\{\rho\} = 1, \quad (2,8)$$

amiből viszont kapjuk, hogy

$$0 \leq \langle n|\rho|n\rangle \leq 1. \quad (2,9)$$

Egyébként a Dirac-féle szimbolikát alkalmazva írhatjuk, hogy

$$\rho = \sum_n |n\rangle p_n \langle n|. \quad (2,10)$$

Ámde akkor  $\langle n|\rho|n\rangle$ , ill.  $p_n$  annak a valószínűségét adja, hogy a  $\varphi_n$  függvénnyel reprezentált állapot realizálódik a sokaságban.

(iii) Kimutatható, hogy

$$Sp\{\rho^2\} = \langle \rho \rangle \leq 1. \quad (2,11)$$

Az egyenlőségjel akkor és csakis akkor van érvényben, ha a sokaság minden eleme ugyanabban az állapotban van, tehát ugyanazzal a (pl.  $\psi_0$ ) hullámfüggvénnyel írható le. Ez a lehetséges maximális információ a statisztikai sokaságról. Ilyenkor *tiszta sokaságról*, ill. *tiszta (primitív) állapotról* beszélünk. Minden más állapot *keverék állapot*.

(iv) Egyszerűen kimutatható, hogy tiszta sokaság esetében a sűrűség-operátor idempotens, tehát

$$\rho^2 = \rho. \quad (2,12)$$

<sup>5</sup> Ilyen szűrőberendezés pl. lineárisan poláros fény (fotonok) esetében a Nicol-féle prizma, mely csak az egyik polarizációs állapotban levő fotonokat engedi át, vagy spektroszkópiában a monokromátor.

<sup>6</sup> A sűrűség-operátor fogalmát a tiszta és vegyes sokaságok egyöntetű jellemzése céljából Neumann vezette be [15]. A sűrűség-operátor fontosabb tulajdonságainak a részletesebb elemzése megtalálható pl. a [19] munkában. (További irodalom ugyanott; l. még [20]).



Egyenlő statisztikai súlyú rendszerek esetén, amikor  $w_k = 1/\mathcal{N}$ , minthogy a  $\psi_0$ -hoz tartozó  $|c_0^k|^2$  együtthatónégyzetek nem lehetnek egynél nagyobbak, kapjuk:

$$|c_0^k| = 1 \quad (k = 1, 2, \dots, \mathcal{N}) \quad (2,13)$$

és így

$$\psi_0^k = e^{i\alpha_k} \varphi_0, \quad (2,14)$$

ahol  $\alpha_k$  valós fázis állandó. Ez azt jelenti, hogy tiszta állapotban a hullámfüggvények csak egy fázis állandóban különbözhetnek egymástól.

(v) Ha a rendszer *Hamilton*-operátora  $\mathbf{H}$ , és  $\psi^k(t)$  az

$$i\hbar \dot{\psi}^k = \mathbf{H} \psi^k \quad (2,15)$$

*Schrödinger*-egyenlet megoldása, akkor ismeretes, hogy

$$\psi^k(t) = \mathbf{U}_t \psi^k(0) \quad (2,16)$$

alakban állítható elő, ahol  $\mathbf{U}_t$  unitér operátor, mely az

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{U}_t = \mathbf{H} \mathbf{U}_t \quad (\mathbf{U}_0 = 1) \quad (2,17)$$

operátor-egyenlet megoldása és explicit alakja:

$$\mathbf{U}_t = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t \right\} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t \right)^n. \quad (\mathbf{U}_t^* = \mathbf{U}_{-t} = \mathbf{U}_t^{-1}). \quad (2,18)$$

Könnyen belátható, hogy az  $\mathbf{q}$  operátor mozgásegyenlete, a *Neumann*-féle egyenlet:

$$i\hbar \dot{\mathbf{q}} = [\mathbf{H}, \mathbf{q}], \quad (2,19)$$

és ennek a megoldása:

$$\mathbf{q}(t) = \mathbf{U}_{-t} \mathbf{q}(0) \mathbf{U}_t. \quad (2,20)$$

Tehát az egyes rendszerek evolúcióját a (2.18) alatti unitér operátor egyértelműen meghatározza.

(vi) A keverék sokaság jellemzésére vezessük be az  $\eta$  operátort, melynek spektruma a  $[-\infty, 0]$  zárt intervallumba esik és nevezzük az  $\eta$  statisztikai várhatóértékét a sokaság *valószínűségi indexének*. Az  $\eta$  operátor segítségével a tiszta állapottól való eltérést kívánjuk mérni, ezért úgy definiáljuk, hogy tiszta állapothoz az operátor  $\eta = 0$  sajátértéke tartozzék. Ha végtelen sok állapotból épül fel a keverék állapot, akkor gyakorlatilag semmilyen információnk nincs a rendszerről, tehát a sűrűség operátor várhatóértéke lehető legjobban eltér a tiszta állapothoz tartozó várható értéktől, azaz  $\eta = -\infty$ . A lehető legegyszerűbb függvénykapcsolat, mely ezeknek a feltételeknek eleget tesz

$$\mathbf{q} = e^\eta = \sum_{n=0}^{\infty} (n!)^{-1} \eta^n. \quad (2,21)$$

Valóban, ha  $\eta = 0$ , akkor  $\mathbf{q} = 1$  és teljesül a tiszta sokaságot jellemző (2.12) feltételi egyenlet is. Igaz, hogy (2.12)  $\eta = -\infty$  esetben is teljesül, amikor pedig  $\eta$ -nak a tiszta állapottól való maximális eltérést kellene leírnia, de, ez nem baj, mert (iii) alapján



$\mathbf{q}$  helyett  $\langle \mathbf{q} \rangle$ -val is jellemezhetjük a tiszta állapottól való eltérést. A továbbiak miatt mégis célszerűbb lesz a sokaság valószínűségi indexét a következőképpen értelmezni:

$$\sigma \stackrel{\text{def}}{=} \langle \eta \rangle = Sp \{ \eta \mathbf{q} \} = Sp \{ \mathbf{q} \log \mathbf{q} \}, \quad (2,22)$$

akkor (1,10) alapján

$$S = -k\sigma = -k Sp \{ \mathbf{q} \log \mathbf{q} \} \quad (2,23)$$

tekinthető a *sokaság entrópiájának*.

(2,8) felhasználásával az entrópia időszerinti differenciálhányadosa

$$\dot{S} = -k\dot{\sigma} = -k Sp \{ \dot{\mathbf{q}} (\log \mathbf{q} + 1) \} = -k Sp \{ \dot{\mathbf{q}} \log \mathbf{q} \} \quad (2,24)$$

alakba írható.

(vii) Stacionárius állapotban a  $\mathbf{q}$  nem függhet az időtől. Ennek szükséges és elegendő feltétele, hogy  $\mathbf{q}$  csak a *Hamilton*-operátor, ill. olyan operátorok függvénye lehet, amelyek mozgásintegrálok, tehát felcserélhetők a  $\mathbf{H}$  operátorral.

Attól függően, hogy milyen mozgásintegrálokat választunk, különböző statisztikai sokaságról beszélünk:

a) Ha a rendszer elemeinek a száma állandó és energiájuk az  $[E, E + \Delta E]$  energiatartományban esik, a sokaság *mikrokanonikus sokaság*. Ez felel meg a zárt termodinamikai rendszereknek.

b) Ha a rendszer elemeinek a száma állandó, de nem az energiájuk, hanem az energia várható értéke állandó:

$$\langle \mathbf{H} \rangle = \text{konst.}, \quad (2,25)$$

akkor a sokaság *kanonikus sokaság*. Ez felel meg a hőfürdőben levő termodinamikai rendszereknek.

c) Ha sem a részecskék száma, sem a rendszerek energiája nem állandó, csupán a várható értékük:

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \text{konst.}, \quad \text{és} \quad \langle \mathbf{H} \rangle = \text{konst.}, \quad (2,26)$$

ahol  $\mathbf{N}$  a részecskeszám-operátor, akkor a sokaságot *kanonikus nagy-sokaságnak* nevezzük. Ez felel meg a hőfürdőben levő olyan termodinamikai rendszernek, amely egy „részecske-rezervoárral” van kapcsolatban.

Az egyes statisztikai sokaságoknak ez a definíciója megegyezik a megfelelő klasszikus statisztikai sokaságok *Gibbs*-féle definíciójával [2].

Kimutatható, hogy pl. kanonikus nagy-sokaság esetén a sűrűség operátor explicit alakja [20]:

$$\mathbf{q} = \mathcal{Z}^{-1}(\mu) \exp \{ \beta (\mu \mathbf{N} - \mathbf{H}) \}, \quad (2,27)$$

ahol

$$\mathcal{Z}(\mu) \stackrel{\text{def}}{=} Sp \{ \exp [\beta (\mu \mathbf{N} - \mathbf{H})] \}, \quad (2,28)$$

$\beta = 1/kT$ ,  $\mu$  a kémiai potenciál, és ebben az esetben a (2,23) alatt definiált entrópia maximális.

Ha  $\mathbf{H}_0$  jelenti az egymással kölcsönhatásban nem levő rendszerek *Hamilton*-operátorát és  $\mathbf{V}$  a kölcsönhatási operátor, akkor a sűrűség-operátor eleget tesz a

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -(\mathbf{H}_0 + \mathbf{V})\mathbf{q} \quad (2,29)$$

Bloch-féle egyenletnek, és a következő alakba írható:

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{q}_0 \mathbf{S}(\beta), \quad (2,30)$$

ahol

$$(2,31) \quad \mathbf{q}_0 = \mathbf{q}_0^{-1}(\mu) \exp \{ \beta (\mu \mathbf{N} - \mathbf{H}_0) \} \quad (\mathbf{q}_0 \equiv Sp \{ \exp [\beta (\mu \mathbf{N} - \mathbf{H}_0)] \})$$

és  $\mathbf{S}(\beta)$ , feltéve, hogy

$$(2,32) \quad \mathbf{V}(\beta) = \exp \{ -(\mu \mathbf{N} - \mathbf{H}_0) \beta \} \mathbf{V} \exp \{ (\mu \mathbf{N} - \mathbf{H}_0) \beta \}$$

a

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \mathbf{S}(\beta) = \mathbf{H}(\beta) \mathbf{V}(\beta) \quad (2,33)$$

egyenlet megoldása [20, 21]. Ily módon lehetőség nyílik reális kvantumrendszerek termodynamikájának a kidolgozására.

(viii) Egyébként könnyen beláthatjuk, hogy a (2,22) alatt definiált  $\sigma(t)$  nem változik az idő változásával. Legyen  $\mathbf{A}$  egy tetszés szerinti dinamikai mennyiség, akkor  $\mathbf{q}$  és  $\mathbf{A}$  evolúciós törvénye miatt

$$\mathbf{q}(t + \Delta t) = \mathbf{U}_{-\Delta t} \mathbf{q}(t) \mathbf{U}_{\Delta t} \quad \text{és} \quad \mathbf{A}(t + \Delta t) = \mathbf{U}_{-\Delta t} \mathbf{A}(t) \mathbf{U}_{\Delta t}, \quad (2,34)$$

tehát

$$\langle \mathbf{A}(t + \Delta t) \rangle = Sp \{ \mathbf{U}_{-\Delta t} \mathbf{q}(t) \mathbf{U}_{\Delta t} \mathbf{U}_{-\Delta t} \mathbf{A}(t) \mathbf{U}_{\Delta t} \} = Sp \{ \mathbf{q}(t) \mathbf{A}(t) \} = \langle \mathbf{A}(t) \rangle \quad (2,35)$$

és minthogy  $\mathbf{A}$  tetszés szerinti dinamikai változó, az állításunkat közvetlenül igazoltuk, hiszen  $\mathbf{A} \equiv \log \mathbf{q}$  esetén is igaz, hogy  $\sigma(t + \Delta t) = \sigma(t)$ . Ebből valóban következik, hogy  $\sigma(t)$ -vel, ill.  $S(t)$ -vel a statisztikai sokaság időbeli változása nem jellemezhető.

### 3. §. Mikro- és makrofizikai dinamikai változók

Tekintsünk most tiszta sokaságokat, a sokaság elemeihez tartozó  $\psi_0(t)$  hullámfüggvényeket jelöljük a továbbiakban  $\psi(t)$ -vel, akkor

$$\psi(t) = \sum_n a_n^k e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n, \quad (3,1)$$

ahol  $\varphi_n$  a

$$\mathbf{H} \varphi_n = E_n \varphi_n \quad (3,2)$$

amplitúdó-egyenlet megoldása és (2,14) alapján

$$a_n^k = c_n^k e^{i\alpha_k} \quad (k = 1, 2, \dots, \mathfrak{N}). \quad (3,3)$$

A  $\varphi_n$  sajátfüggvényeket rendezzük növekvő  $E_n$  sajátértékek szerint. Ebben az esetben pl. a  $\varphi_n$  és  $\varphi_{n+1}$  hullámfüggvényekkel reprezentált állapotban esetleg az összes dinamikai változó nagyon különböző lehet, de az biztos, hogy a két állapot energiája nagyon közel esik egymáshoz. Legyen pl. a tekintetbe vett rendszer egy  $\mathfrak{N}$  atomból álló,  $\Omega = l_1 l_2 l_3$  térfogatú, derékszögű, egyenes hasámban levő gáz, akkor az egyes atomok translációs energiaspektruma:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \left\{ \frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right\} \quad (n_1, n_2, n_3 = \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (3,4)$$



Ezek az energianívók nagyságrendi sorban elrendezhetők és növekvő élhosszúság esetén, a köztük levő távolság négyzetesen csökken, ezért elég nagy hasáb esetén ún. kvázi-folytonos energiaspektrumról beszélünk.<sup>7</sup>

Az  $A$  operátor mátrixa energiareprezentációban

$$\langle n|A|m\rangle = \int \varphi_n^* A \varphi_m dx. \quad (3,5)$$

$A$  megfelelő időtől függő mátrix

$$(3,6) \quad \langle n|A(t)|m\rangle = \langle n|A|m\rangle e^{i\omega_{nm}t}. \quad (\omega_{nm} \stackrel{\text{def}}{=} (E_n - E_m)/\hbar).$$

Az  $\langle n|A(t)|m\rangle$  csak akkor mozgásintegrál, ha  $\langle n|A|m\rangle = A_m \delta_{nm}$ ; tehát, ha  $A$  diagonális, azaz  $[A, H] = 0$ . Mindazonáltal ama mátrixelemek, melyekre  $|E_n - E_m|$  sokkal nagyobb, mint a makroszkopikusan észlelhető energiakülönbségek (ami az alkalmazott spektroszkóp felbontóképességétől függ) nagyon gyorsan fluktuálnak és a fluktuáció periódusa  $|\omega_{nm}|^{-1} = \hbar/|E_n - E_m|$  igen kicsiny. Azt is mondhatjuk, hogy a fluktuáció olyan nagy, hogy egy lehetséges mérés időtartama alatt olyan nagy a fluktuációk száma, hogy csak időbeli átlagot mérhetünk, mely tiszta periodikus folyamatok esetén elhanyagolható. Ily módon azonban az  $\langle n|A(t)|m\rangle$  mátrixnak csak a fődiagonálisához közel fekvő elemei lesznek lényegesen különbözők zérótól, amelyek vagy nem fluktuálnak [mint pl. a fődiagonálisba eső elemek ( $\omega_{nm} = 0$ )], vagy az idő lassan változó függvényei.

Ámde akkor

$$[H, A(t)] = (E_n - E_m)\langle n|A(t)|m\rangle \approx 0, \quad (3,7)$$

hiszen vagy  $|E_n - E_m|$ , vagy  $\langle n|A(t)|m\rangle$  nagyon kicsiny. Ebben az esetben tehát a két operátor majdnem felcserélhető.

Ismeretes, hogy az operátorok felcserélhetősége annak szükséges és elegendő feltétele, hogy a megfelelő dinamikai változók egyidejűleg mérhetők legyenek. A továbbiakban olyan változókat fogunk *makroszkopikus változóknak* nevezni, amelyek a fenti értelemben majdnem felcserélhetők. A többi operátor a *mikroszkopikus operátor*.<sup>8</sup> Ismeretes, hogy egy kvantummechanikai rendszer állapotát egyértelműleg az állapothatározók teljes rendszerével (az egymással felcserélhető operátorok összességével) jellemezhetjük. Makroszkopikus mérés esetén az állapothatározók teljes rendszerét a „majdnem felcserélhető operátorok” összessége határozza meg és ez definiálja a teljes makrofizikai mérést. Ahhoz azonban, hogy a fenti okoskodást kvantitativ és megfogalmazhassuk, a „majdnem felcserélhetőség” fogalmát pontosabban körvonalaznunk kell. Azt azonban közvetlenül beláthatjuk, hogy a makro- és mikrooperátorok fogalma mögött a *Gibbs*-féle durva- és finomszemcsés sokaságok alap gondolata húzódik meg.

Osszuk be az energiaspektrumot  $\Delta E$  intervallumokra, ahol  $\Delta E$  kisebb, mint a spektroszkópunk felbontóképessége, de még nagyon sok energia nívót tartalmaz.

<sup>8</sup> A fenti megoldás végső soron *Neumann*-tól származik [15]. Igen sokat köszörhetünk azonban *N. G. Kampen*-nek [22, 7/3, 8/7], aki *Neumann* gondolatmenetét közkincsé tette és fizikai tartalmát elemezte.

<sup>7</sup> Az egyes energianívók most nyolcszorosan degeneráltak. E degenerációtól a továbbiakban eltekintünk és az azonos  $E_{n_1, n_2, n_3}$  energianívókhoz tartozó sajátfüggvényeket ortonormalizáljuk. Ily módon 8–8 energiasajátérték egybeesik ugyan, de a hozzájuk tartozó  $\varphi_n$  sajátfüggvények, amelyek most síkhullámok szuperpozíciói, ortonormáltak. Hangsúlyozni kívánjuk, hogy amikor majd a továbbiakban értelmezzük a kvantumstatistikai fáziscellát, e degenerációra nem leszünk tekintettel és sok degenerált nívó fog egy cellába tartozni.

Egy-egy ilyen  $(E, E + \Delta E)$  energiatartományt *kvantumstatistikai fáziscellának* fogunk nevezni. Az  $N$ -edik energiatartományban legyen az energia átlagértéke

$$E_N = \frac{1}{G_N} \sum_{n \in N} \langle n | \mathbf{H} | n \rangle, \quad (3,8)$$

ahol  $G_N$  az  $N$ -edik cellához tartozó  $\varphi_n$  ( $n \in N$ ) sajátfüggvényekkel kifesztett altér dimenziója a Hilbert-térben és  $E_N$  eme altér egy nivójának átlagos energiája. Tekintve mármost a Hamilton-operátor spektrális felbontását, érvényes a következő identitás:

$$\mathbf{H} = \sum_n |n\rangle E_n \langle n| \equiv \sum_n \left\{ \sum_{n \in N} E_n |n\rangle \langle n| \right\}. \quad (3,9)$$

hiszen ez nem más, mint a sorfejtés egyszerű zárójelzése, és vezessük be a következő *durvaszemcsés energia-operátort*:

$$\mathfrak{H} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_N E_N \left\{ \sum_{n \in N} |n\rangle \langle n| \right\}, \quad (3,10)$$

Közvetlenül belátható, hogy a „durvaszemcsésítés” itt azt jelenti, hogy az egyes cellákon belül az energiasajátértékeket az átlagértékükkel helyettesítettük, valamint

$$\langle \mathbf{H} \rangle = \langle \mathfrak{H} \rangle, \quad (3,11)$$

tehát a *finomszemcsés energiaoperátor* és a *durvaszemcsés energiaoperátor* statisztikai várhatóértéke megegyezik. Ügyelnünk kell a továbbiakban arra, hogy míg a statisztikai várhatóérték kiszámításánál  $\mathbf{H}$  a  $\mathfrak{H}$ -val helyettesíthető, addig az evolúciós egyenletben (tehát az  $\mathbf{U}_t$  operátor kifejezésében) nem ez a helyzet.

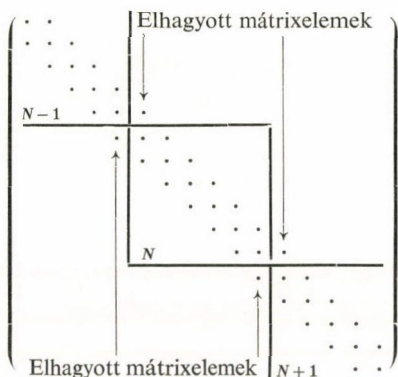
Az  $\mathbf{A}$  operátor spektrális előállítására energiareprezentációban:

$$\mathbf{A} = \sum_n \sum_m |n\rangle \langle n | \mathbf{A} | m \rangle \langle m|. \quad (3,12)$$

Az

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_N \left\{ \sum_{n \in N} \sum_{m \in N} |n\rangle \langle n | \mathbf{A} | m \rangle \langle m| \right\} \quad (3,13)$$

operátor nem azonos átalakítás révén áll elő  $\mathbf{A}$ -ból, de nem különbözik lényegesen tőle, hiszen az  $\mathbf{A}(t)$  fentebb részletezett tulajdonságai miatt viszonylag kevés lényeges mátrixelemet hagytunk el (1. ábra).



1. ábra



Természetesen az  $\mathfrak{A}$  és a  $\mathfrak{H}$  operátorok felcserélhetők, és így van szimultán sajátfüggvényrendszerük.

$$\mathfrak{H}\chi_\lambda^{(N)} = E_N\chi_\lambda^{(N)} \quad \text{és} \quad \mathfrak{A}\chi_\lambda^{(N)} = A_\lambda^{(N)}\chi_\lambda^{(N)}. \quad (3,14)$$

Osszuk be az  $A_\lambda^{(N)}$  spektrumot is  $\Delta A$  intervallumokra. Ez a beosztás egyezze meg az energiacella beosztással. Az  $N$ -edik intervallumban fekvő  $A_\lambda^{(N)}$  sajátértékek átlaga legyen  $A_A^{(N)}$  és értelmezzük a durvaszemcsés  $\mathfrak{A}$  operátort:

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_N \sum_A A_A^{(N)} \left\{ \sum_{\lambda \in A} |\chi_\lambda^{(N)}\rangle \langle \chi_\lambda^{(N)}| \right\}. \quad (3,15)$$

A  $\chi_\lambda^{(N)}$  ( $\lambda \in A$ ) függvények egy lineáris alteret feszítenek ki a Hilbert-térben. Az írásmód egyszerűsítése céljából az  $N$  és  $A$  indexeket helyettesítsük  $J$ -vel és az említett alter ortonormált bázisa legyen a  $\xi_{Ji}$  ( $i=1, 2, \dots, G_J$ ) függvények összessége, ahol  $G_J$  az alter dimenziója. Ezek a függvények az  $\mathfrak{A}$  és  $\mathfrak{H}$  operátorok szimultán sajátfüggvényei:

$$\mathfrak{H}\xi_{Ji} = E_J\xi_{Ji} \quad \text{és} \quad \mathfrak{A}\xi_{Ji} = A_J\xi_{Ji} \quad (i=1, 2, \dots, G_J). \quad (3,16)$$

A  $\{\xi_{Ji}\}$  függvények teljes ortonormált rendszert alkotnak, tehát  $\psi$  a következő alakba írható:

$$\psi = \sum_J \sum_{i=1}^{G_J} b_{Ji} \xi_{Ji}. \quad (3,17)$$

Annak a valószínűsége, hogy a rendszer a  $J$ -edik energiacellába esik:

$$P_J = \sum_{i=1}^{G_J} |b_{Ji}|^2, \quad (3,18)$$

tehát

$$\langle \psi | \mathfrak{A} | \psi \rangle \approx \langle \psi | \mathfrak{A} | \psi \rangle = \sum_J P_J \mathcal{A}_J, \quad (3,19)$$

ahol

$$\mathcal{A}_J = \frac{1}{G_J} \sum_{i=1}^{G_J} \langle Ji | \mathfrak{A} | Ji \rangle. \quad (3,20)$$

Határozzuk most meg  $P_J$  időtől való függését. Minthogy

$$\psi(t) = \sum_J \sum_{i=1}^{G_J} b_{Ji}(t) \xi_{Ji} = U_t \sum_J \sum_{i=1}^{G_J} b_{Ji}(0) \xi_{Ji}, \quad (3,21)$$

a szokott módon kapjuk, hogy

$$b_{Ji}(t) = \sum_{J'} \sum_{i'=1}^{G_{J'}} \langle Ji | U_t | J' i' \rangle b_{J' i'}(0). \quad (3,22)$$

Ámde akkor

$$P_J(t) = \sum_{J' i'} \sum_{J'' i''} \left\{ \sum_{i=1}^{G_J} \langle Ji | U_t | J' i' \rangle \langle Ji | U_t | J'' i'' \rangle^* \right\} b_{J' i'}(0) b_{J'' i''}(0). \quad (3,23)$$

Innen láthatjuk, hogy a  $P_J(t)$  valószínűséget, ami nem más, mint a durvaszemcsés sűrűségoperátor:<sup>9</sup>

$$\mathbf{P} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_J P_J \left\{ \sum_{i=1}^{G_J} |Ji\rangle \langle Ji| \right\}$$

$J$ -edik cellára vonatkoztatott sajátértéke,  $P_J(0)$  még nem határozza meg egyértelműen. Szükségünk van elsősorban arra, hogy  $t=0$  időpillanatban teljes információ legyen a rendszerről (tehát ismernünk kell a sokaság elemeinek a fáziseloszlását  $t=0$  idő pillanatban), másodsorban valamilyen segédfeltevéssel, vagy módszerrel, rögzítenünk kell a  $\mathbf{P}$  evolúcióját.

#### 4. §. A sűrűség operátor durvaszemcsésítése

Mielőtt a legeredményesebbnek mutakozó segédfeltevéseket ismertetnénk, a továbbiak szempontjából célszerűnek látszik, ha a sűrűség operátor egy kézenfekvő durvaszemcsésítését elemezzük.

Felhasználva (2,14) és (3,3) alatti eredményeinket,  $t=0$  időpillanatban a finomszemcsés sűrűségoperátor mátrixa a következő alakba írható:

$$\langle n|\mathbf{Q}(0)|m\rangle = \sum_{k=1}^{\mathfrak{N}} w_k c_n^k c_m^{k*} e^{-i(\alpha_n^k - \alpha_m^k)}, \quad (4,1)$$

$t \neq 0$  időpillanatban pedig:

$$\langle n|\mathbf{Q}(t)|m\rangle = \langle n|U_{-t}\mathbf{Q}(0)U_t|m\rangle = \sum_{k=1}^{\mathfrak{N}} w_k c_n^k c_m^{k*} \exp \{ -i(\alpha_n^k - \alpha_m^k) - i\omega_{nm}t \}. \quad (4,2)$$

A sűrűségoperátor egy lehetséges durvaszemcsésítése abból áll, hogy a  $\mathbf{P}(t)$  operátort a következőképpen értelmezzük:

$$\mathbf{P}(t) = \frac{1}{t} \int_0^t \mathbf{Q}(\tau) d\tau = \frac{1}{t} \int_0^t U_{-\tau}\mathbf{Q}(0)U_{\tau} d\tau, \quad (4,3)$$

melynek mátrixelemei:

$$\langle n|\mathbf{P}(t)|m\rangle = \frac{\langle n|\mathbf{Q}(0)|m\rangle}{t} \int_0^t e^{-i\omega_{nm}\tau} d\tau = \langle n|\mathbf{Q}(0)|m\rangle \frac{1 - e^{-i\omega_{nm}t}}{i\omega_{nm}t}. \quad (4,4)$$

Ez a durvaszemcsésítés szemléletesen annyit jelent, hogy hagyjuk, hogy a sokaság egyes elemei a rendszer evolúciójának megfelelően fejlődjenek a  $[0, t]$  időintervallumban és vesszük ennek az „időbeli sokaságnak” az átlagát. A  $\mathbf{P}(t)$  definíciója konzekvens, mert  $\mathbf{P}(0) = \mathbf{Q}(0)$ .

Mindenekelőtt közvetlenül beláthatjuk, hogy  $\mathbf{P}(t)$  hermitikus és

$$\begin{aligned} Sp \{ \mathbf{P}(t) \} &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_n \langle n|\mathbf{Q}(0)|n\rangle \frac{1 - e^{-i\omega t}}{i\omega t} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_n \langle n|\mathbf{Q}(0)|n\rangle \frac{ite^{-i\omega t}}{it} = \\ &= \sum_n \langle n|\mathbf{Q}(0)|n\rangle = Sp \{ \mathbf{Q}(0) \} = 1. \end{aligned} \quad (4,5)$$

<sup>9</sup> Olv. nagy  $\varrho$ !



Ugyanakkor azonban

$$\begin{aligned}
 Sp \{P^2(t)\} &= \sum_n \sum_m \langle n|P(t)|m\rangle \langle m|P(t)|n\rangle = \\
 &= \sum_n \sum_m |\langle n|Q(0)|m\rangle|^2 \frac{1 - e^{-i\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}t} \frac{1 - e^{i\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}t} = \\
 &= \sum_n \sum_m |\langle n|Q(0)|m\rangle|^2 \frac{2 - (e^{-i\omega_{nm}t} + e^{i\omega_{nm}t})}{\omega_{nm}^2 t^2} = \\
 &= \sum_n \sum_m |\langle n|Q(0)|m\rangle|^2 \frac{1 - \cos \omega_{nm}t}{\omega_{nm}^2 t^2} < \sum_n \sum_m |\langle n|Q(0)|m\rangle|^2 = Sp \{Q^2(0)\};
 \end{aligned}
 \tag{4,6}$$

ugyanis közvetlenül belátható, hogy

$$\frac{1 - \cos x}{x^2} < \frac{1}{2} \quad (x \neq 0).
 \tag{4,7}$$

Nevezetesen tekintsük az

$$y(x) \equiv 1 - \frac{1}{2} x^2 - \cos x \leq 0
 \tag{4,8}$$

függvényt. Ennek az  $x=0$  pontban maximuma van, hiszen

$$y' = -x + \sin x = \begin{cases} > 0, & \text{ha } x < 0 \\ = 0, & \text{ha } x = 0 \\ < 0, & \text{ha } x > 0. \end{cases}
 \tag{4,9}$$

Ámde akkor (4,6) azt jelenti, hogy a durvaszemcsés sűrűségoperátor még akkor is keveréksokaságot ír le, ha  $P(o) = Q(o)$  eredetileg tiszta sokaság volt.

Most elgondolkozhatnánk azon, mi történik akkor, ha a durvaszemcsésítődés  $\Delta t = \hbar/\Delta E$  ideig folyik, feltéve, hogy a  $\Delta E \approx |E_n - E_m|$  legkisebb mérhető energia különbségnek felel meg. Ebben az esetben ugyanis a durvaszemcsés operátorok bevezetését azzal indokolhatnánk, hogy mérőműszereink objektíve meghatároznak egy olyan legkisebb időtartamot, amely alatt lejátszódó fluktuációkat nem észlelünk. Mégis úgy tűnik, hogy ez a gondolatmenet nem vezet érdekesebb eredményre, amire az utal, hogy  $t \rightarrow \infty$ -re

$$\langle n|P(\infty)|m\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle n|Q(0)|m\rangle e^{-i\omega_{nm}\tau} d\tau = \begin{cases} \langle n|Q(0)|n\rangle, & \text{ha } n=m \\ 0, & \text{ha } n \neq m, \end{cases}
 \tag{4,10}$$

következésképpen

$$Sp \{P^2(\infty)\} = Sp \{Q^2(0)\};
 \tag{4,11}$$

hiszen ez ugyancsak tiszta sokaság, valahányszor  $P(o) = Q(o)$  az volt. Ezen túlmenően azonban látható, hogy

$$\langle n|P(t)|m\rangle = 0, \quad \text{ha } t = 2k/|\omega_{nm}| = 2k\hbar/|E_n - E_m|, \quad (k = 1, 2, \dots)
 \tag{4,12}$$

tehát az  $\langle n|\mathbf{P}(t)|m\rangle$  mátrixelemek a fluktuáció következtében az  $|E_n - E_m|$  energia-különbségtől függően periodikusan kioltódnak.

Egyébként a durvaszemcsés sűrűség operátor elég nagy  $t > 0$  esetében majdnem felcserélhető a finomszemcsés energiaoperátorral, hiszen

$$\langle n|[\mathbf{H}, \mathbf{P}(t)]|m\rangle = (E_n - E_m)\langle n|\mathbf{P}(t)|m\rangle, \quad (4,13)$$

és a jobb oldali kifejezés a  $\mathbf{P}(t)$  nevezőjében fellépő  $t$  miatt valóban kicsiny, eltekintve attól, hogy  $t = 2k\hbar/|E_n - E_m|$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) időpillanatokban pontosan eltűnik.

Határozzuk most meg a  $\mathbf{P}(t)$  idő szerinti differenciálhányadosát. Minthogy

$$\mathbf{P}(t + \Delta t) - \mathbf{P}(t) = \frac{1}{t(t + \Delta t)} \left\{ t \int_0^t \mathbf{Q}(\tau) d\tau + t \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{Q}(\tau) d\tau - (t + \Delta t) \int_0^t \mathbf{Q}(\tau) d\tau \right\}, \quad (4,14)$$

és az integrál középérték tétel alapján

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{Q}(\tau) d\tau = \mathbf{Q}(t), \quad (4,15)$$

végül is kapjuk, hogy

$$\dot{\mathbf{P}}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{P}(t + \Delta t) - \mathbf{P}(t)}{\Delta t} = \frac{\mathbf{Q}(t) - \mathbf{P}(t)}{t}, \quad (4,16)$$

amiből viszont következik, hogy

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \dot{\mathbf{P}}(t) = 0; \quad (4,17)$$

tehát elég nagy  $t$ -re a durvaszemcsés sűrűségoperátor jó közelítéssel stacionáris sokaságot ír le, viszont közben (4,12) miatt  $\dot{\mathbf{P}}(t)$  nem-diagonális elemei periodikusan változnak.

(2,22) alatti definícióknak megfelelően a durvaszemcsés sűrűségoperátorral jellemzett sokaság entrópiája

$$\mathbb{S}'(t) = -k Sp \{ \mathbf{P}(t) \log \mathbf{P}(t) \}, \quad (4,18)$$

mely növekvő  $t$ -re  $S$ -hez tart. Ennek idő szerinti differenciálhányadosa (4,5) alapján:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbb{S}}'(t) &= -k Sp \{ \dot{\mathbf{P}}(t) (\log \mathbf{P}(t) + 1) \} = -k Sp \{ \dot{\mathbf{P}}(t) \log \mathbf{P}(t) \} = \\ &= -k \sum_n \sum_m \langle n | \dot{\mathbf{P}}(t) | m \rangle \langle m | \log \mathbf{P}(t) | n \rangle. \end{aligned} \quad (4,19)$$

Minthogy

$$\log \mathbf{P}(t) = -1 + \mathbf{P}(t) + \frac{1}{2} [\mathbf{P}(t) - 1]^2 \{ 1 + \vartheta [\mathbf{P}(t) - 1] \}^{-1}, \quad (0 < \vartheta < 1), \quad (4,20)$$

írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} \mathbb{S}'(t) &= k \left\{ \sum_n \langle n | \dot{\mathbf{P}}(t) | n \rangle - \sum_n \sum_m \langle n | \dot{\mathbf{P}}(t) | m \rangle [\langle m | \mathbf{P}(t) | n \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \langle m | (\mathbf{P}(t) - 1)^2 \{ 1 + \vartheta [\mathbf{P}(t) - 1] \}^{-1} | n \rangle] \right\}. \end{aligned} \quad (4,21)$$



Itt azonban az első tag eltűnik. A második tag szögletes zárójelben levő része pedig a következő alakba írható:

$$\langle m|\mathbf{Q}(0)|n\rangle \frac{1 - e^{-i\omega_{nm}t}}{i\omega_{nm}t} + \left[ |\langle m|\mathbf{Q}(0)|n\rangle|^2 \frac{1 - \cos \omega_{nm}t}{\omega_{nm}^2 t^2} - \delta_{mn} \right] \{\dots\}^{-1}. \quad (4,22)$$

Azonnal észrevevessük, hogy a  $\delta_{mn}$ -es tag nem ad járulékot, hiszen az  $m$ -re való összegzés után jó közelítéssel  $\dot{\mathbf{P}}(t)$  spurjára vezet. A másik két tag, valahányszor  $t = 2k\hbar/|E_n - E_m|$  ( $k=1, 2, \dots$ ) azonosan eltűnik. Minthogy  $\dot{\mathbf{P}}(t)$  spurja  $t=0$  és  $t=\infty$  esetben eltűnik, azt kaptuk, hogy  $t=0$ ,  $t=2k\hbar/|E_n - E_m|$  és  $t=\infty$  időpontokban eltűnik, tehát  $\mathcal{S}'(t)$ , és így maga  $\mathcal{S}'(t)$  is,  $t=0$ -tól kezdve oszcillál a nulla érték körül, miközben az oszcilláció amplitúdója  $t \rightarrow \infty$  esetben közelítőleg  $1/t$  arányban csökken.

Fenti megfontolásainkat az alábbiakban foglalhatjuk össze: jóllehet időbeli átlagképzéssel értelmezhetünk durvaszemcsés sűrűségoperátort és ezzel durvaszemcsés statisztikai sokaságot, de ennek a sokaságnak az entrópiája erősen oszcillálni fog. Ezzel konkrét példával megerősítettük az alábbi paragrafus végén tett ama megállapításunkat, hogy pusztán a sokaság elemeinek a kvantummechanikai evolúciójából nem adódik ki a  $\mathbf{P}(t)$  olyan evolúciós törvénye, mely az entrópiánövekedésére vezetne.

Konstruáljunk most durvaszemcsés sűrűségoperátort azzal a módszerrel, amelyet az előbbi paragrafusban vázoltunk. A finomszemcsés energia operátor statisztikai várhatóértékét írjuk a következő alakba

$$\langle \mathbf{H} \rangle = \sum_n E_n \langle n|\mathbf{Q}|n \rangle = \sum_J \left\{ \sum_{n \in J} E_n \langle n|\mathbf{Q}|n \rangle \right\}, \quad (4,23)$$

ahol  $J$  jelöli a  $J$ -edik energiasejtét, melyhez a *Hilbert*-térben egy  $G_J$  dimenziós lineáris altér tartozik. Ha a  $|Ji\rangle$  ( $i=1, 2, \dots, G_J$ ) ket-vektorok eme altér bázisvektorai, akkor a  $J$ -edik cellában az energia átlagértéke

$$E_J = \frac{\sum_{i=1}^{G_J} E_i \langle Ji|\mathbf{Q}|Ji \rangle}{\sum_{i=1}^{G_J} \langle Ji|\mathbf{Q}|Ji \rangle}, \quad (4,24)$$

ámde akkor

$$\langle \mathbf{H} \rangle = \sum_J G_J E_J \frac{1}{G_J} \sum_{i=1}^{G_J} \langle Ji|\mathbf{Q}|Ji \rangle = \sum_J E_J \langle J|\mathbf{P}|J \rangle G_J, \quad (4,25)$$

ahol

$$\langle J|\mathbf{P}|J' \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\delta_{JJ'}}{G_J} \sum_{i=1}^{G_J} \langle Ji|\mathbf{Q}|J'i \rangle. \quad (4,26)$$

Az így bevezetett durvaszemcsés  $\mathbf{P}$  operátor diagonális elemei megadják annak a  $P_J$  valószínűségét, hogy a statisztikai sokaság elemei a  $J$ -edik intervallumba esnek. Azzal kapcsolatban, hogyan határozható meg  $\mathbf{P}$  időbeli változása, ugyanazt mondhatjuk, amit  $P_J(t)$ -vel kapcsolatban az előző paragrafus végén részleteztünk.

## 5. §. A Pauli-féle master-egyenlet

Visszatérve a  $P_J$  időtől való függésének a meghatározásával kapcsolatos problémára, általában azzal a feltételezéssel szokás élni, hogy a sokaság elemeinek a fáziseloszlása  $t=0$  esetben teljesen véletlenszerű („random phase approximation”) és  $b_{J'i'}(0)b_{J''i''}(0)$  átlaga:

$$\overline{b_{J'i'}(0)b_{J''i''}(0)}^{\text{sokaság}} \equiv \delta_{J'J''}\delta_{i'i''} \frac{P_{J'}(0)}{G_{J'}}, \quad (5,1)$$

ami éppen megegyezik (4,26) alatti definíciókkal. Ámde akkor (3,23) alapján

$$P_J(t) = \sum_{J'} \left\{ \sum_{i,i'} |\langle Ji | U_t | J' i' \rangle|^2 \frac{P_{J'}(0)}{G_{J'}} \right\}. \quad (5,2)$$

Legyen

$$T_t(J|J') \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i,i'} |\langle Ji | U_t | J' i' \rangle|^2 G_{J'}, \quad (5,3)$$

akkor végül is kapjuk, hogy

$$P_J(t) = \sum_{J'} T_t(J|J') P_{J'}(0). \quad (5,4)$$

Az így definiált  $T_t(J|J')$  valószínűségi amplitúdó nyilvánvaló módon annak a valószínűségét adja, hogy a  $[0, t]$  időintervallumban a sokaság valamely eleme átmegy a  $J'$  energiacellából a  $J$  cellába.

Közvetlenül beláthatjuk, hogy  $T_t(J|J')$  kielégíti a következő relációkat:

$$T_0(J|J') = \delta_{JJ'}; \quad T_t(J|J') \geq 0; \quad \sum_J T(J|J') = 1. \quad (5,5)$$

A mikroreverzibilitás feltétele az, hogy

$$T_t(J|J') = T_t(J'|J). \quad (5,6)$$

Legyen az időegység alatti átmenetek valószínűsége

$$\mathcal{W}_{JJ'} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{t} \sum_{i,i'} |\langle Ji | U_t | J' i' \rangle|^2, \quad (5,7)$$

akkor a mikroreverzibilitási feltétel a következő alakba írható:

$$\mathcal{W}_{JJ'} G_{J'} = \mathcal{W}_{J'J} G_J. \quad (5,8)$$

Valahányszor  $T_t(J|J')$  kielégíti a Chapman–Kolmogorov-egyenletet:

$$T_{t_1+t_2} = \sum_{J''} T_{t_2}(J|J'') T_{t_1}(J''|J'), \quad (5,9)$$

Markov-féle evolúcióról beszélünk.

Tegyük fel, hogy  $\Delta t$  idő alatt a rendszer makroállapota nem változik jelentékeny mértékben, de  $\Delta t \gg \hbar/|E_n - E_m|$ , akkor

$$T_{\Delta t}(J|J'') = \delta_{JJ''} \left( 1 - \Delta t \sum_{J'} \mathcal{W}_{J'J''} \right) + \Delta t \mathcal{W}_{JJ''}, \quad (5,10)$$



akkor (5,9) alapján

$$T_{t+\Delta t}(J|J') = \sum_{J''} \{ \mathcal{W}_{JJ''} T_t(J''|J') - \mathcal{W}_{J''J} T_t(J|J') \} \Delta t + T_t(J|J') \quad (5,11)$$

és

$$\begin{aligned} \dot{T}_t(J|J') &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \{ T_{t+\Delta t}(J|J') - T_t(J|J') \} = \\ &= \sum_{J''} \{ \mathcal{W}_{JJ''} T_t(J''|J') - \mathcal{W}_{J''J} T_t(J|J') \}. \end{aligned} \quad (5,12)$$

Ámde akkor

$$\begin{aligned} \dot{P}_J(t) &= \sum_{J'} \dot{T}_t(J|J') P_{J'}(0) = \\ &= \sum_{J'} \sum_{J''} \{ \mathcal{W}_{JJ''} T_t(J''|J') P_{J'}(0) - \mathcal{W}_{J''J} T_t(J|J') P_{J'}(0) \}. \end{aligned} \quad (5,13)$$

és így végül is (5,4) alapján kapjuk, hogy

$$\dot{P}_J(t) = \sum_{J''} \{ \mathcal{W}_{JJ''} P_{J''}(t) - \mathcal{W}_{J''J} P_J(t) \}. \quad (5,14)$$

Ezt az egyenletet nevezzük *Pauli-féle master-egyenletnek* [24/5].

Az (5,14) alatti egyenlet fizikai jelentése kézenfekvő. A jobb oldali első tagból származik a találati valószínűség időegységre eső növekedése, a másodiktól a csökkenése. A *Pauli-egyenlet* nagy fontosságára való tekintettel célszerű lesz, ha az alábbiakban kissé behatóbban elemezzük és néhány megjegyzést fűzünk hozzá:

(i) A levezetésnél, mely ebben a formulában *Van Kampen*-től származik [22,8/6], lényegesen kihasználtuk az (5,9) alatti *Chapman—Kolmogorov-egyenletet*, tehát a *Pauli-egyenlet Markov-folyamatot* ír le.

(ii) A rendszer *Hamilton-operátorát*

$$\mathbf{H} \equiv \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V} \quad (5,15)$$

alakba írva és feltéve, hogy az energiaspektrum kvázi-folytonos, az időegység alatti átmeneti valószínűségre kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{JJ'} &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \frac{\lambda^2}{G_{J'}} \sum_{i,i'} |\langle J i | \mathbf{V} | J' i' \rangle|^2 \delta(E_J - E_{J'}) = \\ &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \frac{\lambda^2}{G_{J'}} |\langle J | \mathbf{V} | J' \rangle|^2 \delta(E_J - E_{J'}). \end{aligned} \quad (5,16)$$

Ámde akkor az (5,8) alatti mikroreverzibilitási feltétel alapján írhatjuk, hogy

$$\dot{P}_J(t) = \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \lambda^2 \sum_{J'} \delta(E_J - E_{J'}) |\langle J | \mathbf{V} | J' \rangle|^2 \left\{ \frac{P_{J'}}{G_{J'}} - \frac{P_J}{G_J} \right\}. \quad (5,17)$$

(iii) Az átmeneti valószínűség  $\lambda^2$ -tel arányos. Ez arra utal, hogy a részecskék közti kölcsönhatás figyelembe vételénél elegendő a perturbációszámítás második közelítésére, tehát a részecskék közti páronkénti ütközéseket reprezentáló másodrendű

gráfokra szorítkozni [26], melyről már a *Born*-féle approximáció legalacsonyabb rendű közelítése is számot ad. Első pillanatra azt gondolhatnánk, hogy ez az eredmény csak igen gyenge kölcsönhatások esetén vezet elfogadható eredményre. Mindazonáltal ritka gázoknál rövid hatótávolságú erős kölcsönhatásokat is megengedhetünk [26].

(iv) Még a (2,18) alatti *Neumann*-egyenlet reverzibilis folyamatokat ír le, addig az (5,14) alatti *Pauli*-egyenlet irreverzibilis folyamatokat generál. Ezt a következőképpen láthatjuk be:

A (4,19) alatti egyenletnek megfelelően a durvaszemcsés sokaság entrópiája

$$\mathbb{S}(t) = -k Sp \{ \mathbf{P}(t) \log \mathbf{P}(t) \} = -k \sum \langle J | \mathbf{P}(t) | J \rangle \log \langle J | \mathbf{P}(t) | J \rangle, \quad (5,18)$$

ahol  $\langle J | \mathbf{P}(t) | J \rangle$ , ill.  $\mathbf{P}(t)$  most a (4,26) egyenlettel definiált durvaszemcsés sűrűség operátor. A (4,25) egyenletből közvetlenül láthatjuk (bár természetesen ez a (4,26) alatti definícióból is következik), hogy  $\langle J | \mathbf{P} | J \rangle$  annak a valószínűségét adja, hogy a sokaság valamelyik eleme a  $J$ -edik energiacellába esik, tehát

$$P_J = \langle J | \mathbf{P} | J \rangle G_J; \quad (5,19)$$

ámde akkor, tekintettel arra, hogy a  $J$ -edik cellában  $G_J$  energianívó van,

$$\mathbb{S} = -k \sum P_J \log \frac{P_J}{G_J}. \quad (5,20)$$

Az entrópia idő szerinti differenciálhányadosa (5,14) felhasználásával

$$\begin{aligned} \dot{\mathbb{S}} &= -k \sum \dot{P}_J \log \frac{P_J}{G_J} = -k \sum_J \sum_{J'} \{ \mathfrak{W}_{JJ'} P_{J'} - \mathfrak{W}_{J'J} P_J \} \log \frac{P_J}{G_J} = \\ &= -\frac{1}{2} k \sum_J \sum_{J'} \left\{ \mathfrak{W}_{JJ'} G_{J'} \frac{P_{J'}}{G_{J'}} - \mathfrak{W}_{J'J} G_J \frac{P_J}{G_J} \right\} \left( \log \frac{P_J}{G_J} - \log \frac{P_{J'}}{G_{J'}} \right), \end{aligned} \quad (5,21)$$

melyet az (5,8) alatti mikroreverzibilitási feltétel alapján a következő alakba írhatunk:

$$\dot{\mathbb{S}} = \frac{1}{2} k \sum_J \sum_{J'} \mathfrak{W}_{JJ'} G_{J'} \left( \frac{P_J}{G_J} - \frac{P_{J'}}{G_{J'}} \right) \left( \log \frac{P_J}{G_J} - \log \frac{P_{J'}}{G_{J'}} \right) \geq 0. \quad (5,22)$$

Az egyenlőségjel akkor van érvényben, ha

$$P_J(t) = \text{konst. } G_J. \quad (5,23)$$

Ámde akkor  $P_J$  nem függ az időtől és így a sokaság stacionáris; ebből következik, hogy stacionáris állapotban az entrópiának szélsőértéke van.

Jelöljük az egyensúlyi állapotnak megfelelő valószínűségét  $P_J^{(e)}$ -vel, akkor

$$P_J^{(e)} = \frac{G_J}{G}, \quad \text{ahol } G = \sum J G_J. \quad (5,24)$$

Ámde akkor (5,20) a következő alakba írható:

$$\mathbb{S} = -k \sum_J P_J \log \frac{P_J}{G P_J^{(e)}} = \log G - k \sum_J P_J \log \frac{P_J}{P_J^{(e)}}. \quad (5,25)$$



Vegyük először is észre, hogy ez nem lehet nagyobb, mint  $\log G$ . Nevezetesen: írjuk a második tagot a következő alakba:

$$\sum_j \{P_j \log P_j - P_j \log P_j^{(e)} - P_j + P_j^{(e)}\}. \quad (5,26)$$

Ennek az összegnek azonban minden tagja nem-negatív (*Klein-féle lemma*<sup>10)</sup>), melyet a következőképpen láthatunk be:

$$y(x) \equiv e^x(x-1) + 1 = xe^x - e^x + 1 \geq 0, \quad (5,27)$$

hiszen  $x=0$  helyen  $y=0$  és ez minimum, ugyanis differenciálhányadosa  $y' = xe^x$  azonos előjelű  $x$  előjével. Végezzük el az  $x = \log \alpha - \log \beta$  helyettesítést, akkor feltéve, hogy  $\alpha > 0$  és  $\beta > 0$ , kapjuk, hogy

$$\frac{\alpha}{\beta} (\log \alpha - \log \beta - 1) + 1 \geq 0, \quad (5,28)$$

tehát

$$\alpha \log \alpha - \alpha \log \beta - \alpha + \beta = \begin{cases} > 0, & \text{ha } \alpha \neq \beta \\ = 0, & \text{ha } \alpha = \beta \end{cases} \quad (5,29)$$

és ez  $\alpha \equiv P_j$ ,  $\beta \equiv P_j^{(e)}$  helyettesítéssel éppen a bizonyítandó állítás. Ennek alapján azonban már valóban nyilvánvaló, hogy  $\mathbb{S} \leq \log G$ , hiszen (5,25) alatti egyenletünkben nem-negatív mennyiséget vonunk le  $\log G$ -ből. Egyenlőségjel a fenti egyenletekkel akkor van érvényben, ha  $P_j = P_j^{(e)}$ , tehát egyensúlyi állapotban. Fentebb láttuk, hogy  $\mathbb{S}(t)$  az idő monoton növekvő függvénye és egyensúlyi állapotban szélsőértéke van. A fenti okoskodással tehát bebizonyítottuk az entrópia növekedésének a tételét.

(v) Végül megjegyezzük, hogy  $\mathcal{S}_{JJ'}$ , az (5,16) egyenletben szereplő  $\delta$ -függvény miatt a rendszer  $\Omega$  térfogatának lineáris függvénye, tehát  $\Omega \rightarrow \infty$  határesetben divergál. Ennek az az oka, hogy az ún. *termodinamikai határesetben*, valahányszor tehát

$$\mathcal{S} \rightarrow \infty, \Omega \rightarrow \infty \quad \text{és} \quad \mathcal{S}/\Omega = \text{konst.} < \infty, \quad (5,30)$$

minél nagyobb a rendszer, annál inkább növekszik az időegység alatti átmenetek száma. Ez azonban nem jelent lényeges problémát, mert ilyenkor úgys térfogategységre vonatkoztatott mennyiségekkel dolgozunk [28]. Szokás az erre az esetre vonatkoztatott *Pauli*-egyenletet redukált *master*-egyenletnek is nevezni.

Fentebb említettük már, hogy mi a *Pauli*-egyenletet főleg *Van Kampen* gondolatmenetét követve vezettük le [8/6]. Ez a levezetés, amikor tehát csak  $t=0$  időpillanatban tételezünk fel teljesen véletlenszerű fázisoszlást, végső soron *L. Van Hove* 1955-ben publikált alapvető vizsgálatára vezethető vissza [29], 6/2]. *Van Hove* eme vizsgálataitól szokás az irreverzibilis folyamatok modern elméletének a kibontakozását számítani, melyek *Pauli* elméletének a kritikai elemzéséből és továbbfejlesztésből indultak ki. *Pauli* ugyanis annak idején ama feltevés alapján vezette le a *master*-egyenletet, hogy minden  $t=k\Delta t$  időpillanatban ( $k=1, 2, \dots$ ) a fázisoszlás újra teljesen véletlenszerűvé válik („repeated random phase approximation”). Ez az „ismételt véletlenszerű fázisoszlási feltevés” kétségtelenül mesterkélt és nehezen

<sup>10)</sup> L. [27]. A lemma bizonyítása egyébként megtalálható [3] 6. függelékében is.



indokolható, ezen túlmenően azonban ellentmondásra is vezet [29]. Ezzel a problémával nem kívánunk részletesebben foglalkozni és az idézett irodalomban részletesen elemzett érvekhez csupán a következő megjegyzést kívánjuk hozzáfűzni.: A 4. §-ban láttuk, hogy pl. az időbeli átlaggal képzett durvaszemcsés sűrűség operátor különböző mátrix elemei nem azonos fázisban kerülnek vissza a finomszemcsés sűrűség operátorral jellemzett  $t=0$  időpillanatbeli véletlenszerű fáziseloszlással rendelkező kezdeti állapotba, hanem az  $|E_n - E_m|$  energiakülönbségtől függően  $\Delta t_{nm} = \hbar |E_n - E_m|$  pillanatokban, ami úgy tűnik, hogy szintén ellentmondásban van az ismételt véletlenszerű fáziseloszlási feltétellel.

*Van Hove* nem konkrét reális termodinamikai rendszer, hanem az alábbi feltételekkel körvonalazott modell esetében végezte a számításait:

a) A finomszemcsés sűrűség operátor  $t=0$  időpillanatban diagonális:

$$\langle n | \rho(0) | n' \rangle = \delta_{nn'}.$$

b) A választott modellt az (5,30) egyenlettel jellemzett termodinamikai határesetben vizsgálta.

c) Olyan gyenge csatolást tételezett fel, melynél az (5,15) egyenletben szereplő csatolási állandó  $\lambda=0$  és a relaxációs idő  $\tau=\infty$ , úgyhogy  $\lambda^2\tau = \text{konst.} < \infty$ .

d) Csupán centrális kétrészecske-kölcsönhatásra szorítkozott, mely  $v(r)$  potenciális energia esetén, a távolsággal fordított arányban tart zéróhoz, tehát  $v(r)r \rightarrow 0$ , ha  $r \rightarrow 0$ .

e) A durvaszemcsés sűrűség operátort a (4,26) alatti alakban vette fel.

A kvantumszámok közül az egyik folytonosan változott és így a *Poincaré*-féle ciklus időtartama végtelen volt. Ez a modell a ritka gázok legfontosabb sajátosságait reprezentálja, melyek esetében tetszés szerinti erősségű kölcsönhatásra a c) feltétel  $c \rightarrow 0$  és  $\tau \rightarrow \infty$  feltevéssel helyettesíthető, ha közben  $c \cdot t = \text{konst.} < \infty$ , ahol  $c$  a koncentráció. Eredményei jó közelítéssel alkalmazhatók voltak  $\text{He}^3$  gáz esetében.

A fenti feltételekkel jellemzett „ritka gázok” tulajdonságai még lényegesen különböznek a gyakorlati szempontból igazán fontos reális gázok sajátosságaitól, kétségtelen azonban, hogy igen nagy az elméleti jelentőségük, mert az ideális gázok mellett olyan modellként szolgálnak, melyek esetében a számítások — bizonyos diagramokra való felösszegezéssel<sup>11</sup> — elvégezhetők.

Jóllehet az irodalomban erre nem találtunk utalást, fel kívánjuk hívni a figyelmet arra, hogy fluoreszkáló molekulák oldatai [50] legalábbis kis koncentráció esetén, amikor az ún. sugárzásmentes energiaátadás a domináns, hőfürdőben levő olyan ritka gáznak tekinthetők, melyek a fenti kritériumot kielégítik. Nevezetesen: ebben az esetben a fluoreszkáló folyadék két alapszisztémából áll, melyek közül egyik az egymással gyenge kölcsönhatásban lévő fluoreszkáló molekulák összege, a másik a túlsúlyban levő oldószer molekuláinak a rendszere. Az utóbbiak csupán termikus kapcsolatban vannak az előzőkkel, ezért részletesebb sajátosságai közömbösek a fluoreszkálás számos jellemzőjének a vizsgálatánál és összességük valóban hőfürdőnek tekinthető. Ily módon remélhető, hogy a fenti módszerek segítségével a fontos fizikai rendszer egyes mélyebb törvényszerűségei az irreverzibilis folyamatok modern elmélete keretében konzekvensen értelmezhetők, ill. feltárhatók. Megjegyezzük, hogy a fluoreszcencia-spektrum elemzésénél nincsen szükség eme egyéb-

<sup>11</sup> Az idevonatkozó irodalom és a módszer összefoglalása megtalálható az alábbi munkákban: [30–32, 33/1, 34/5, 35/(1, 3, 5–9), 36/18, 37/(2, 10, 12, 15), 8/4], továbbá l. még [25].



ként igen komplikált molekulák specifikus tulajdonságainak kvantumkémiái elemzésére, mert a fluoreszcencia jelensége e molekuláknak azzal a tulajdonságával van mindössze kapcsolatban, hogy a gerjesztési energia igen rövid ( $10^{-9} - 10^{-13}$  sec) relaxációs idővel, csupán a hőmérséklettől függően, újra eloszlik a rezgési szabadsági fokok közt és nagymértékben függetlenül a molekula szerkezetétől — legalábbis a két legalsó elektronállapotban — jól definiálható eloszlással rendelkezik [38]. E problémával a közeli jövőben részletesen kívánunk foglalkozni, hiszen az eddigi kvalitatív megfontolások is meglepően jó eredményre vezettek.

### 6. §. Általánosított master-egyenletek

*Van Hove* úttörő vizsgálatai után új fejezet kezdődött az irreverzibilis folyamatok statisztikai elméletében, amely az azóta eltelt rövid idő alatt is lényegesen biztatóbb eredményeket hozott, mint a korábbi kezdeményezések [4,5]. A fentebb már ismételten idézett összefoglaló munkákban [3–14] részletes hivatkozások találhatók az idevonatkozó irodalomra. A továbbiakban ezért csupán a két legnépszerűbb elmélet rövid ismertetésére szorítkozunk. Ezek közül az egyiket *Van Hove* és munkatársai [39–43, 6/2, 8/6, 9/5, 11, 14/5], a másikat *L. Prigogine* és munkatársai [44–47, 10, 14/5] dolgozták ki. A két módszer kapcsolatát *S. Fujita* [48, 14/5] elemezte.

A (2,19) alatti *Neumann*-egyenlet megoldásaként adódó időtől függő finomszemcsés sűrűség diagonális elemei energiareprezentációban:

$$\langle n | \mathbf{q}(t) | n \rangle = \langle n | e^{i\mathbf{H}t} \mathbf{q}(0) e^{-i\mathbf{H}t} | n \rangle. \quad (6,1)$$

A statisztikai sokaság elemeinek (2,18) alatti megadott evolúciós operátorát a  $\mathbf{H}$  operátorhoz tartozó

$$\mathbf{R}(z) = \frac{1}{\mathbf{H} - z} \quad (6,2)$$

rezolvens operátor segítségével írjuk a következő alakba:

$$\mathbf{U}_t \equiv e^{-i\mathbf{H}t} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_c dz e^{-izt} \mathbf{R}(z), \quad (6,3)$$

ahol ennél a *Fourier*-transzformációnál az integrációs utat úgy választjuk meg a komplex  $z$ -síkban, hogy az óramutató járásával ellenkező irányban körüljárva kirekesztjük a valós  $z$ -tengelyt, ill. a valós  $z$ -tengelynek azt a szakaszát, ahol a rezolvens operátor pólusai (a  $\mathbf{H}$  sajátértékei) elhelyezkednek [25].

(5,15) és az

$$\mathbf{R}(z) = (\mathbf{H}_0 - z)^{-1} - (\mathbf{H}_0 - z) \mathbf{V} \mathbf{R}(z) \quad (6,4)$$

identitás alapján

$$\mathbf{R}(z) = \frac{1}{\mathbf{H}_0 - z} - \frac{1}{\mathbf{H}_0 - z} \mathbf{V} \frac{1}{\mathbf{H}_0 - z} + \frac{1}{\mathbf{H}_0 - z} \mathbf{V} \frac{1}{\mathbf{H}_0 - z} \mathbf{V} \frac{1}{\mathbf{H}_0 - z} \mp \dots \quad (6,5)$$

Ámde akkor

$$\langle n | \mathbf{q}(t) | n \rangle = -\frac{1}{(2\pi)^2} \oint_c dz \oint_c dz' e^{-i(z-z')t} \langle n | \mathbf{R}(z') \mathbf{q}(0) \mathbf{R}(z) | n \rangle. \quad (6,6)$$

Legyen

$$D_n(z) \stackrel{\text{def}}{=} \langle n | \mathbf{R}(z) | n \rangle = \frac{1}{\mathbf{H}_0 - G_n(z) - z}, \quad (6,7)$$

tehát a rezolvens operátor diagonális eleme. Itt bevezettük a következő rövidített jelölést:

$$(6,8) \quad G_n(z) \stackrel{\text{def}}{=} \lambda^2 \langle n | \{ \mathbf{V} \mathbf{R}(z) \mathbf{V} - \lambda \mathbf{V} \mathbf{R}(z) \mathbf{V} \mathbf{R}(z) \mathbf{V} \pm \dots \}_{id} | n \rangle,$$

ahol az  $id$  index arra utal, hogy  $G_n(z)$  kiszámításához a zárójelben levő operátorhoz tartozó irreducibilis gráfok járulékának diagonális elemét kell venni, akkor közvetlenül belátható, hogyan származtathatók a  $\mathbf{H}$  operátor sajátértékei a  $\mathbf{H}_0$  sajátértékeiből, hiszen a  $\mathbf{H}$  sajátértékei  $D_n(z)$  pólusai és ezek  $G_n(z)$  arányban vannak eltolódva  $\mathbf{H}_0$  sajátértékeihez képest [25]. *Van Hove* kimutatta, hogy  $\langle n | \mathbf{R}(z') \mathbf{R}(z) | n \rangle$  az alábbi algebrai egyenletet elégíti ki:

$$(6,9) \quad \begin{aligned} \langle n | \mathbf{R}(z') \mathbf{R}(z) | n \rangle &= D_n(z') D_n(z) \{ \langle n | \mathbf{Q}(0) | n \rangle + \\ &+ \sum_{n'} \langle n | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n' \rangle \langle n' | \mathbf{R}(z') \mathbf{R}(z) | n' \rangle \}, \end{aligned}$$

ahol az  $\langle n | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n \rangle$  átmeneti mátrixelemet a következő egyenlet definiálja:

$$(6,10) \quad \langle n' | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n \rangle = \{ (\mathbf{V} - \lambda \mathbf{V} \mathbf{D}(z) \mathbf{V} + \dots) | n' \rangle \langle n' | (\mathbf{V} - \lambda \mathbf{V} \mathbf{D}(z) \mathbf{V} + \dots) \}_{id} | n \rangle,$$

ahol az  $n'$  közbülső (átmeneti) állapotok különböznek az  $n$ -edik állapottól. Termodynamikai határesetben

$$(6,11) \quad G_n(z) - G_n(z') = -i \sum_{n'} \langle n' | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n \rangle,$$

ahol

$$(6,12) \quad \langle n' | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n' \rangle \stackrel{\text{def}}{=} i \{ D_{n'}(z) - D_{n'}(z') \} \langle n' | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n' \rangle.$$

Amde akkor a

$$(6,13) \quad \mathbf{R}(z) - \mathbf{R}(z') = \{ (z - z') + [\mathbf{G}(z) - \mathbf{G}(z')] \} \mathbf{R}(z) \mathbf{R}(z')$$

identitás alapján [25]:

$$(6,14) \quad \begin{aligned} (z - z') \langle n | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n \rangle &= \{ D_n(z) - D_n(z') \} \langle n | \mathbf{Q}(0) | n \rangle - \\ &- i \sum_{n'} \{ \langle n | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n' \rangle \langle n' | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n \rangle - \langle n' | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n \rangle \langle n | \tilde{\mathcal{W}}(z, z') | n' \rangle \}. \end{aligned}$$

Legyen

$$(6,15) \quad \langle n | \mathbf{Q}_E(t) | n \rangle \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2\pi^2} \oint dz e^{2izt} \langle n | \mathbf{Q}(E + z, E - z) | n \rangle,$$

akkor  $\langle n | \mathbf{Q}(t) | n \rangle$  spektrális előállítás:

$$(6,16) \quad \langle n | \mathbf{Q}(t) | n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \langle n | \mathbf{Q}_E(t) | n \rangle \quad (t > 0),$$

és a  $\langle n | \mathbf{Q}_E(t) | n \rangle$  — tehát a sűrűség mátrix spektrális intenzitása, mely most a korábbi



megoldásaink során bevezetett durvaszemcsés sűrűség mátrixot helyettesíti — az alábbi általánosított master-egyenletet elégíti ki:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n | \mathbf{Q}_E(t) | n \rangle = \langle n | f_E(t) | n \rangle \langle n | \mathbf{Q}(0) | n \rangle + \quad (6,17)$$

$$+ 2\pi \int_0^t d\tau \sum_{n'} \{ \langle n | \mathcal{W}_E(t-\tau) | n' \rangle \langle n' | \mathbf{Q}_E(\tau) | n \rangle - \langle n' | \mathcal{W}_E(t-\tau) | n \rangle \langle n | \mathbf{Q}_E(\tau) | n' \rangle \},$$

ahol

$$\langle n | \mathcal{W}_E(t) | u' \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \oint dz e^{2izt} \langle n | \mathcal{W}(E+z, E-z) | n' \rangle \quad (6,18)$$

és

$$\langle n | f_E(t) | n \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \oint dz e^{2izt} \{ D_n(E+z) - D_n(E-z) \}. \quad (6,19)$$

A (6,17) alatti master-egyenletet az

$$\langle n | \mathbf{Q}(0) | n \rangle = 0 \quad (6,20)$$

kezdeti feltétellel kell megoldani.

A (6,17) alatti általánosított master-egyenlet a sűrűségmátrix spektrális intenzitásának az evolúcióját határozza meg. Ez a spektrális intenzitás általában komplex, tehát lehetővé teszi disszipatív-rendszerek tárgyalását is [48]. Mindazonáltal *Van Hove* kimutatta, hogy  $\langle n | \mathbf{Q}_E(t) | n \rangle$  gyenge kölcsönhatás esetén általában valós és annak a valószínűségét adja, hogy a tekintetbe vett részrendszer az  $E = \langle \mathbf{H}_0 - \lambda \mathbf{V} \rangle$  energia-héjon tartózkodik, szokás ezért részleges valószínűségnek is nevezni.

A lényegesebb különbség az (5,14) és a (6,17) alatti egyenletek közt az, hogy az utóbbi nem-*Markov*-féle evolúcióra vezet. Megjegyezzük végül, hogy *Van Hove* és munkatársai [40—43], speciális modell analízise során, arra az egyébként kézenfekvő, de igen fontos eredményre jutottak, hogy az egyensúlyi állapot bizonyos oszcilláció után áll be.

A *Prigogine—Résibois*-egyenlethez a következőképpen jutunk. Részletesen kiírva a (2,19) alatti *Neumann*-egyenletet ( $\hbar = 1$ ):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \mathbf{Q}(t) | n' \rangle = \sum_{n''} \{ \langle n | \mathbf{H} | n'' \rangle \langle n'' | \mathbf{Q}(t) | n' \rangle - \langle n | \mathbf{Q}(t) | n'' \rangle \langle n'' | \mathbf{H} | n' \rangle \}, \quad (6,21)$$

tetszés szerinti  $\mathbf{A}$  dinamikai változó esetén vezessük be az alábbi jelölést:

$$\langle n | \mathbf{A} | n \rangle \stackrel{\text{def}}{=} A_{n-n'} \left( \frac{n+n'}{2} \right) \equiv A_v(N) = \left\langle N + \frac{v}{2} \left| \mathbf{A} \right| N - \frac{v}{2} \right\rangle, \quad (6,22)$$

ahol

$$n - n' \equiv v \quad \text{és} \quad \frac{1}{2} (n + n') \equiv N. \quad (6,23)$$

Ámde akkor (6,21) a következő alakba írható:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varrho_v(N, t) = \sum_{v'} \langle v | \mathbf{H}(N) | v' \rangle \varrho_{v'}(N, t), \quad (6,24)$$

ahol

$$\langle v | \mathbf{H}(N) | v' \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \eta^{+v'} \mathbf{H}_{v-v'}(N) \eta^{-v'} - \eta^{-v'} \mathbf{H}_{v-v'}(N) \eta^{+v} \quad (6,25)$$

és  $\eta^{\pm v}$  egy eltolási operátor, melyet a következőképpen definiálunk:

$$\eta^{\pm v_j} f(N_j) = f(N_j \pm v_j/2) \eta^{\pm v_j}, \quad (6,26)$$

feltéve, hogy  $f(N_j)$  az  $N_j$  valamilyen függvénye.

A (6,24) alatti egyenletben  $N$  konstans paraméternek tekinthető és (6,24) formális megoldása:

$$\varrho_v(N, t) = \sum_{v'} \langle v | e^{-i\mathbf{H}(N)t} | v' \rangle \varrho_{v'}(N, 0). \quad (6,27)$$

Legyen

$$\mathcal{R}_N(z) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\mathbf{H}(N) - z} \quad (6,28)$$

a megfelelő rezolvens operátor, akkor (6,3) alatti egyenletünknek megfelelően az evolúciós operátor:

$$e^{-i\mathbf{H}(N)t} = -\frac{1}{2\pi i} \oint dz e^{-izt} \mathcal{R}_N(z). \quad (6,29)$$

Hasonló megfontolással és jelöléssel, mint fentebb, végül is (6,17) helyett kapjuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho_0(N, t) = \int_0^t d\tau \langle 0 | \mathcal{G}_j(N, t - \tau) | 0 \rangle \varrho_0(N, \tau), \quad (6,30)$$

ahol

$$\langle v | \mathcal{G}_j(N, t) | v \rangle \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2\pi i} \oint dz e^{-izt} \langle v | \mathcal{G}_j(N, z) | v \rangle. \quad (6,31)$$

A (6,30) alatti evolúciós egyenletet nevezzük *Prigogine–Résibois*-egyenletnek. Az itt megadott alakja túlságosan tömör ahhoz, hogy a (6,17) alatti *Van Hove*-féle egyenlettel való azonos struktúráját szembeszökkően láthassuk. Mindazonáltal ez az egyenlet is nem-*Markov*-féle evolúcióra vezet és az megmutatható [48], hogy az a körülmény, hogy (6,17) inhomogenitási tagot is tartalmaz, nem lényeges.

Ezeknek az elméleteknek a jelentősége abban rejlik, hogy mind a (6,17), mind pedig a (6,30) alatti evolúciós-egyenletek alapján bizonyítható, hogy  $t \rightarrow \infty$  határesetben a termodinamikai rendszer egyensúlyi állapotba kerül. Pontosabban megfogalmazva a következőket mondhatjuk: *Bármilyen kezdeti állapotból induljon is ki a rendszer — termodinamikai terminológiával élve — bármely intenzitás mennyiség várható értéke  $t \rightarrow \infty$  esetében a rendszer teljes Hamilton-operátorával meghatározott sűrűség-operátorral számítható kanonikus várható értékéhez tart.*

## 7. §. Fajn egyik tézisének kritikája

Az előzőekben áttekintést nyújtottunk az irreverzibilis folyamatok modern statisztikai elméletéről, és speciálisan az entrópiánövekedés problémájáról. Nyugodtan állíthatjuk, hogy a fenti összefoglalás híven tükrözi a rendelkezésünkre álló



irodalomban foglaltakat. Egyetlen kivétel csupán *V. N. Fajn* egy megjegyzése, melyhez egy rövid megjegyzést kívánunk fűzni.

*Fajn* az entrópiánövekedésről és a relaxációs jelenségek elméletéről írt, egyébként igen tanulságos és hatalmas tárgyi tudásáról számotadó dolgozatának [13] 6. §-ában vitatja azt az általánosan elfogadott nézetet, hogy az entrópiánövekedés a durvaszemcsés statisztikai sokaság entrópiájának a sajátja és azt bizonygatja, hogy a finomszemcsés sokaság entrópiája is növekedik. Tanulmányozva az érvelését igen kézenfekvő, hogyan juthatott erre az eredményre, hiszen egyszerűen feltette, hogy a finomszemcsés sűrűség operátor diagonális elemei kielégítik az (5,14) alatti *Pauli*-egyenletet és ilyen körülmények között csak természetes, hogy a finomszemcsés operátor entrópiája is növekszik. Csakhogy ez a feltevés nem jogosult, mert a finomszemcsés operátor evolúcióját a *Neumann*-egyenlet határozza meg és a durvaszemcsés sűrűség operátor evolúciós egyenletének más meghatározására azért van lehetőség, mert — amint arra 3. § végén rámutattunk —  $\langle J|P(0)|J \rangle$  még nem határozza meg egyértelműen a durvaszemcsés sűrűség operátor evolúcióját.

Az entrópiánövekedés az (5,9) alatti *Chapman—Kolmogorov*-egyenlet, ill. az (5,14) *Pauli*-egyenlet következménye és nem a durvaszemcsésítésé. Erre külön kitérünk a 4. §-ban, amikor megmutattuk, hogy pusztán a durvaszemcsésítés még önmagában nem vezet entrópiánövekedésre.

#### IRODALOM

- [1] *P. T. Landsberg*, *Rev. Mod. Phys.* 28, 363, 1956.
- [2] *Horváth J.*, *Termodinamika és statisztikai mechanika*, Tankönyvkiadó, Bp. 1960.
- [3] *D. Ter Haar*, *Rev. Mod. Phys.* 27, 289—338, 1955.
- [4] *R. Eizenschitz*, *Statistical Theory of Irreversible Processes*, Oxford Univ. Press, Oxford, 1958.
- [5] *S. R. De Groot*, *Termodinamika dei processi irreversibili*, Scuola Int. di Fis. *E. Fermi*, Varenna, Corso X; Bologna, 1959.
- [6] *C. De Witt—J. F. Detoeuf*, *La théorie des gaz neutres et ionisés*, Univ. de Grenoble; Hermann, Paris, 1959.
- [7] *S. Flügge*, *Handbuch der Physik*, Bd. III/2. Springer, Berlin, 1959.
- [8] *E. G. D. Cohen*, *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1962.
- [9] *P. Caldirola*, *Ergodic Theories*. *Proc. Int. School of Physics E. Fermi*, Varenna, Course XIV; Acad. Press. New York, 1961.
- [10] *I. Prigogine*, *Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Interscience, New York, 1962.
- [11] *S. Fujita*, *Intr. to Quantum Statistics of Interacting Particles*, Interscience, New York, 1962.
- [12] *C. V. Chester*, *Rep. Prog. Phys.* 27, 411—472, 1963.
- [13] *V. M. Fajn*, *UFN. SSSR.* 79, 641, 1963; *Fortschr. Phys.* 11, 525—582, 1963.
- [14] *K. W. Ford*, *Brandeis Univ. Summer Institute 1962*; Vol. 3., *Statistical Physics*, Benjamin, New York, 1963.
- [15] *J. v. Neumann*, *Zs. f. Phys.* 57, 30, 1929; *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, Berlin, 1932.
- [16] *Balaton, J.—Rényi A.*, *MTA. Mat. Kutató Intézetének Közleményei*, 4, 9, 1956.
- [17] *L. Brillouin*, *Science and Information Theory* 2. kiad. Academic Press, New York, 1962.
- [18] *F. London—E. Bauer*, *La théorie de l'observation en mécanique quantique*, Hermann, Paris, 1939.
- [19] *D. Ter Haar*, *Rep. Progr. Phys.* 24, 304—362, 1961.
- [20] *Horváth J.*, *A MTESZ Szegedi Csoportjának Emlékkönyve*, Szeged, 1964.
- [21] *Horváth J.*, *Magy. Fiz. Folyóirat*, 12, 137, 1964.
- [22] *N. G. Van Kampen*, *Physica*, 20, 603—622, 1954; *Fortschr. d. Phys.* 4, 405, 1956.
- [23] *K. Hoffman*, *Banach Spaces of Analytic Functions*, Prentice-Hall, London, 1962. 48. old.
- [24] *P. Debye*, *Probleme der modernen Physik*, Hirzel, Leipzig, 1928.

- [25] Horváth J., A rezolvens módszer. Nem publikált szemináriumi jegyzet, Szeged, 1963.
- [26] B. A. Lipmann—J. Schwinger, Phys. Rev, 79, 469, 1950.
- [27] O. Klein, Zs. f. Phys. 72, 767, 1931.
- [28] R. Balescu, Phys. Fluids, 3, 52, 1960.
- [29] L. Van Hove, Physica, 21, 517, 1955.
- [30] L. Van Hove, Physica, 21, 901, 1955.
- [31] N. M. Hugenholtz, Physica, 23, 481, 533, 1957.
- [32] N. M. Hugenholtz—L. Van Hove, Physica, 24, 363, 1958.
- [33] C. De Witt—J. F. Detoeuf—P. Nozieres, Le problème a n-corps, Dunod, Paris, 1959.
- [34] W. E. Britten—B. W. Downs, Lectures in Theoretical Physics, Vol. 2. Interscience, New York, 1960.
- [35] D. Pines, Quantum Theory of Many-Particle Systems, Benjamin, New York, 1961.
- [36] E. R. Caianello, Field Theory and the Many-Body Problem, Academic Press, New York, 1961.
- [37] E. R. Caianello, The Many-Body Problem, Academic Press, New York, 1962.
- [38] N. W. Wolkenstein, Struktur und physikalische Eigenschaften der Moleküle, Teubner, Leipzig, 1960.
- [39] L. Van Hove, Physica, 23, 441, 1957; 25, 268, 1958.
- [40] L. Van Hove—E. Verboven, Physica, 27, 418, 1961.
- [41] E. Verboven, Irreversible Phenomena in Conducting Crystals, Diss., Utrecht, 1961.
- [42] A. Janner—L. Van Hove—E. Verboven, Physica, 25, 1341, 1962.
- [43] P. Berger—J. M. J. Van Leeuwen—E. Verboven, Physica, 29, 1409, 1963.
- [44] I. Prigogine—P. Résibois, Physica, 25, 268, 1958.
- [45] I. Prigogine—R. Balescu, Physica, 25, 281, 302, 1958; 26, 145, 1960.
- [46] J. Philippot, Physica, 27, 490, 1961.
- [47] P. Résibois, Physica, 27, 541, 1961.
- [48] S. Fujita, Physica, 27, 940, 1961.
- [49] I. D. Landau—E. M. Lifshitz, Statistical Physics, Pergamon, London, 1958. 120—123. §§.
- [50] Horváth J., Magy. Fiz. Folyóirat, 13. (megjelenőben)



# A SZILÁRDTESTEK VEZETÉSI TULAJDONSÁGAIRÓL\*

FOGARASSY BÁLINT

KFKI, Budapest

A szilárdtestek vezetési tulajdonságainak elméletét tárgyaljuk a Boltzmann-féle transzportegyenlet alapján. A Boltzmann-egyenlet megalapozása céljából először foglalkozunk a periodikus potenciáltérben mozgó elektron dinamikai tulajdonságaival. Ezután igen általános feltételek mellett előállítjuk a transzportegyenlet megoldását sorfejtés alakjában, ahol a sorfejtés a külső perturbációk szerint (elektromos tér, hőmérsékleti gradiens, mágneses tér) történt. Az általános megoldást alkalmazzuk elsőrendű, majd a mágneses tér szerint tetszőszerinti rendű közelítésben és ennek alapján tárgyaljuk a termoelektromos, galvanomágneses, termomágneses és galvano-termomágneses effektusokat. Befejezésül a relaxációs idő közéleti érvényességi tartományát vizsgáljuk meg.

## Bevezetés

Szilárdtestek vezetési jelenségeinek elméletével hosszú idő óta foglalkoznak a fizikusok. *Drude* már 1900-ban olyan magyarázatot adott [1], amely komoly eredményeket ért el az akkori kísérleti eredmények értelmezése területén. Feltételezte, hogy a szilárdtesten belül szabad elektronok mozognak, amelyek külső tér bekapcsolása esetén hőmozgásukon túlmenően többlet sebességre tesznek szert és így a makroszkopikus áramokat értelmezni lehet. Nagy érdeme volt ennek a tárgyalásnak, hogy az elektromos és hővezetés kapcsolatát leíró tapasztalati Wiedemann–Franz törvényt [2] elméletileg megalapozta.

Röviddel az első próbálkozások után *Lorentz* már statisztikus mechanikai megfontolásokat alkalmaz [3]. Az elektronok fázistérbeli eloszlását a Boltzmann-egyenlet alapján határozza meg úgy, hogy kezdetben Boltzmann-eloszlást tételez fel. Meglepő fordulat, hogy ez az elmélet azokat a jelenségeket sem tudja helyesen értelmezni, amelyeket *Drude* primitívebb elmélete tudott, sőt további probléma merül fel, amely szerint az elektronok anomálisan nagy fájhővel kellene hogy rendelkezzenek, amelyet pedig semmiféle tapasztalati tény nem igazol.

Hosszú ideig a felmerült problémák megoldatlanok maradtak és csak a természet kvantumosszerűségének felfedezése vitte előbbre az elméletet. Az elektronok a Pauli-elvnek alávetett részecskék és így kezdeti állapotukat nem a Boltzmann-, hanem a Fermi–Dirac-eloszlással kell leírni. *Sommerfeld* az előbbi, *Lorentz* által kidolgozott elméleten csak ezt a kis változtatást tette [4] és eredményként a tapasztalattal meglepően jó egyezésre jutott. A Lorentz-elmélettel szemben történt nagy változás könnyen érthető, ha figyelembe vesszük, hogy a Pauli-elv miatt jelen esetben az elektronoknak csak egy kis része gerjeszthető termikusan – hiszen az alacsonyabb energiájú elektronokhoz közeli magasabb energianívók szintén be vannak töltve elektronokkal –, így a vezetési folyamatban is csak az elektronoknak egy kis része, a közel Fermi-energiával rendelkező elektronok vesznek részt. Ez a megfontolás a modernebb elméletek keretei között sem módosult és ez adja a magyarázatát annak, hogy a fizikusok igyekeznek a szilárdtestek Fermi-energiáját, illetve Fermi-felületét meghatározni.

A kvantummechanika fejlődésével együtt nagy lépésekben haladt előre a vezetési folyamatok elmélete is. A szabad elektron képről áttérnek a valóságos helyzetnek megfelelő periodikus potenciáltérben mozgó elektron tárgyalására a kvantummechanika módszereivel. Itt az alapvető dolgozatok helyett *Wilson* könyvére utalunk [5]. Az elmélet ezen a szinten most már alkalmas lett volna a természet többé-kevésbé hű leírására, de a feladatok végleges megoldása egyre-másra matematikai nehézségekbe ütközött. Ezen a problémán mind a mai napig nem lehetett teljes mértékben

\* Érkezett 1964. júl. 10.



kiegészítő módon segíteni. A vezetési jelenségek elméletére éppúgy, mint a szilárdtestfizika egyéb területeire jellemző a különböző közelítő módszerek tömeges alkalmazása és sok esetben nincs tisztázva ezeknek a módszereknek az érvényességi tartománya. Jelen dolgozat feladata is — mint látni fogjuk — ilyen jellegű kérdések tisztázása lesz.

Bár a történeti áttekintéssel kapcsolatban teljességre közel sem törekszünk, meg kell még említeni *Kubo* módszerét [6], aki további absztrakcióval az áramsűrűséghez rendelt operátor várható értékét számolja a térelméletben szokásos módszerekkel. Eljárásának nagy előnye az eddigiekkel szemben, hogy az egy-elektron közelítéstől meg lehet szabadulni, ami elvileg igen nagy előrehaladás, de a praktikus számításokban természetesen újabb problémákat vet fel. Ezek a matematikai nehézségek teszik indokolttá az egy-elektron közelítésben végzett számításokat mind a mai napig.

E rövid történeti áttekintés után vizsgáljuk meg a további tárgyalásunk alapját képező Boltzmann-féle transzport-egyenlet alakját, származtatásával kapcsolatos problémákat és érvényességi tartományát. A szilárdtest vezetési elektronjainak kvantummechanikai leírását a Bloch-függvények adják. Ezek az állapotfüggvények egy sávindektől eltekintve az  $\vec{r}$  helyvektor és  $\vec{k}$  hullámszámvektor függvényei, így az elektront reprezentáló pont most nem a klasszikus fázistérben, hanem az  $(\vec{r}, \vec{k})$  hatdimenziós térben mozog. Legyen  $f(\vec{r}, \vec{k})$  a betöltési valószínűség, vagy a továbbiakban röviden eloszlásfüggvény, amely egy normálási faktortól eltekintve az  $(\vec{r}, \vec{k})$  pont egységnyi környezetében tartózkodó elektronok száma. Ennek a függvénynek a meghatározása a vezetési jelenségek elméletének fő feladata, mert ennek ismeretében az áramok már integrálással előállíthatók. A Liouville-tétel következményeként az  $f(\vec{r}, \vec{k})$  függvény teljes időbeli megváltozása zérus, azaz

$$\frac{\delta f}{\delta t} = \left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{\text{folyt.}} - \left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{\text{ütk.}} = 0, \quad (1.1)$$

ahol az első tag az elektronok folytonos mozgásától eredő változást írja le:

$$\left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{\text{folyt.}} = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{r} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{k}, \quad (1.2)$$

és a második tag az ütközések következménye, amelyben a negatív előjel konvenció kérdése. Ennek értékét is felírhatjuk, ha bevezetjük a  $W(\vec{k}, \vec{k}')$  átmeneti valószínűséget, amely azt jelenti, hogy az időegység alatt milyen valószínűséggel jut az elektron a teljesen betöltött  $\vec{k}$  állapotból a betöltetlen  $\vec{k}'$  állapotba ütközések következtében. Ennek segítségével a  $\vec{k}$  állapotból kiszórt és a  $\vec{k}$  állapotba szóródó elektronok száma

$$-\left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{\text{ütk.}} = \sum_{\vec{k}'} \{W(\vec{k}, \vec{k}')f(\vec{k}, \vec{r})[1-f(\vec{k}', \vec{r})] - W(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}', \vec{r})[1-f(\vec{k}, \vec{r})]\}. \quad (1.3)$$

Az összegezést az egy Brillouin-zónába eső lehetséges  $\vec{k}'$  állapotokra kell kiterjeszteni. Ezek viszont nagyon sűrűn helyezkednek el, így  $\vec{k}'$ -t folytonos változónak tekinthetjük és az összegezést integrálással helyettesíthetjük figyelembe véve, hogy az egységnyi  $\vec{k}$ -térben  $V/8\pi^3$  számú lehetséges  $\vec{k}'$  állapot van. Ekkor (1.3) így írható

$$-\left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{\text{ütk.}} = \frac{V}{8\pi^3} \int \{W(\vec{k}, \vec{k}')f[1-f'] - W(\vec{k}', \vec{k})f'[1-f]\} d^3 \vec{k}'. \quad (1.4)$$

Stacioner problémák vizsgálatára szorítkozva az (1.2) és (1.4) egyenleteket az (1.1) kifejezésbe helyettesítve nyerjük a további vizsgálataink alapjául szolgáló Boltzmann-féle transzport-egyenletet:

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{r} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{k} = \frac{V}{8\pi^3} \int \{W(\vec{k}', \vec{k})f'[1-f] - W(\vec{k}, \vec{k}')f[1-f']\} d^3 \vec{k}'. \quad (1.5)$$

Itt és már az előző képletben is  $V$  a kristály térfogatát jelenti és az  $f(\vec{r}, \vec{k})$  függvény mellől a rövidség kedvéért elhagytuk az argumentumot, illetve  $f'$ -vel jelöltük, ha a függvény a  $\vec{k}'$ -től függ. Az integrálok mind most, mind a továbbiakban határozott integrálokat jelentenek, amelyek a  $\vec{k}$ -térben



az első Brillouin-zónára, a konfigurációs-térben — ha ilyen van jelölve — a kristály térfogatára terjednek ki. Így például

$$\frac{1}{4\pi^3} \iint f(\vec{k}, \vec{r}) d^3\vec{r} d^3\vec{k} = N, \quad (1.6)$$

ahol  $N$  az összes vezetési elektronok száma a kristályban. Egyensúlyi állapotban, azaz külső perturbációtól mentes esetben az eloszlásfüggvény természetesen a Fermi-Dirac által adott függvénybe megy át:

$$f_0(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{\exp \left\{ \frac{E(\vec{k}) - \zeta(\vec{r})}{kT(\vec{r})} \right\} + 1}, \quad (1.7)$$

ahol  $E(\vec{k})$  a kristályra jellemző energia-hullámszámvektor kapcsolat,  $\zeta(\vec{r})$  a Fermi-nívó,  $k$  a Boltzmann-állandó és  $T(\vec{r})$  az abszolút hőmérséklet.

Meg kell jegyeznünk, hogy Boltzmann a róla elnevezett egyenlet tulajdonképpen gázmolekulákra vonatkozóan vezette le még abban az időben, amikor a szilárdtestek vezetési tulajdonságai nem álltak az érdeklődés középpontjában [7]. A szilárdtestekre vonatkozó Boltzmann-egyenlet általunk bemutatott előállítás a kézikönyvekben szokásos gondolatmenet követte, de valójában csak formális levezetésnek tekinthető. A korrekt eljárás a következő lett volna [8]: Az  $N$  részecskéből álló rendszer valószínűség-sűrűség-függvényét a teljes fázistérben értelmezi a statisztikus mechanika. Ez a függvény  $6N$  koordinátától függ és annak a valószínűségét jelenti, hogy a teljes fázistér egy pontja körüli egységnyi térfogatban található a rendszer. Meghatározására a Liouville-egyenlet szolgál. Ha ezt a lineáris egyenletet megfelelő  $6R$  koordináta szerint integráljuk, akkor az ún. csonkított-sűrűség-függvény meghatározására kapunk egyenletet, amely természetesen már kevesebb információt tartalmaz a rendszerről, hiszen  $R$  részecskére átlagoltunk. Sajnálatos módon a csonkított-sűrűség-függvény meghatározására szolgáló egyenlet eggyel kevesebb rendben csonkított függvényt is tartalmaz, amelynek meghatározására vagy egy újabb egyenletet kell felírni, — de akkor ismét hasonló probléma lép fel — vagy fizikai szempontból többé-kevésbé indokolható feltétellel kell élni. Így például, ha a részecskék között csak gyenge kölcsönhatás működik, akkor kicsi a korreláció és szokásos a „molekula káosz” feltételezés, amely szerint a több-részecske sűrűség-függvény szorzat alakban írható fel, ahol az egyes tényezők egy-egy részecske fázistérben vannak értelmezve. Ilyen közelítést alkalmazva a Liouville-egyenletet  $(N-1)$ -szer integrálva, azaz egyrészecske közelítésben nyerjük a Boltzmann-egyenletet.

A most szavakban elmondott eljárás kvantummechanikai keretek között is alkalmazható, amikor is a valószínűség-sűrűség-függvény szerepét a sűrűség-mátrix, a „molekula káosz” feltételezés szerepét a „rendezetlen, vagy független fázisok” feltételezése veszi át. Sőt az utóbbi feltételezésről *Van Hove* perturbációszámítás módszert alkalmazva kimutatta, hogy elhagyható [9]. A Boltzmann-egyenlet levezetéséről mondottakat ki kell még egészíteni azzal, hogy ezeket az általános természetű megfontolásokat kimondottan periodikus potenciáltérben mozgó részecskék esetére nem alkalmazták, így például célszerű lenne esetleg a kvantummechanikai számításokat megismételni és a mátrixelemeket a Bloch-függvények mint bázis segítségével számítani.

Bár megfontolásaink alapját a Boltzmann-féle transzport-egyenlet képezi, a levezetés részleteibe nem mentünk bele, mert meg vagyunk győződve, hogy a formális levezetéssel azonos eredményre jutottunk volna és csak az érvényességi tartomány pontos körülhatárolását biztosította volna egy gondos kvantum-statisztikus mechanikai megfontolás. Mindenesetre az egyenlet érvényességét a következő feltételek korlátozzák, amelyek egy része közvetlenül az egyenlet felírásából látható, más részét a további számítások során fogjuk felhasználni:

1. Egy-elektron közelítésben dolgozunk.
2. Egy-sáv vezetést veszünk csak figyelembe és a sáv-sáv átmeneteket elhanyagoljuk.
3. Csak olyan kölcsönhatásokat veszünk figyelembe, amelyekről feltételezzük, hogy a fonon-spektrumot nem befolyásolják, azaz elegendő egy Boltzmann-egyenletet felírni. A szórások közötti interferencia jelenségeket elhanyagoljuk.
4. Feltételezzük, hogy a  $W(\vec{k}, \vec{k}')$  átmeneti valószínűség létezik és független a külső perturbációktól. Más szóval, feltételezzük, hogy a külső perturbáció nem keveri lényegesen össze és nem változtatja meg az eredeti állapot energianívóit, csupán átmeneteket hoz létre azok között.
5. Csak stacioner problémával foglalkozunk, azaz az eloszlásfüggvény explicite nem függ az időtől.



6. Feltételezzük, hogy a külső perturbáló terek, azaz az  $\vec{E}$  elektromos-,  $\vec{H}$  mágneses tér- és  $\partial T/\partial \vec{r}$  hőmérsékletgradiens állandók és az eloszlásfüggvény ezek szerint történő sorfejtése konvergens.

7. A vizsgálat alá vett szilárdtestet homogénnek tekintjük, ami annyit jelent, hogy az eloszlásfüggvény az  $\vec{r}$  helykoordinátától csak a  $T$  hőmérsékleten keresztül függ.

Láttuk eddig, hogy a vizsgálataink alapját a Boltzmann-féle transzport-egyenlet fogja képezni a felsorolt feltételek szemelött tartásával. Röviden vázolni szeretnénk még, hogy a vizsgálatokat milyen irányban végeztük. Összefoglalóan két gondolatkörről beszélhetünk, amelyeket röviden

két betű jellemez:  $\vec{k}$  és  $\tau$ , azaz a hullámszámvektor időderívtja és a relaxációs idő. Ezek közül az első tulajdonképpen még a Boltzmann-egyenlet megalapozásához tartozik, a második egy komplexebb problémakört jellemez, amely magában foglalja a Boltzmann-egyenlet sorfejtéssel történő megoldását, majd ennek alapján a relaxációs idő közelítés érvényességi tartományának meghatározását.

Az eloszlásfüggvény  $\vec{r}$  és  $\vec{k}$  független változóiról azt mondtuk, hogy azok a periodikus potenciálterben mozgó elektron (Bloch-elektron) kvantummechanikai jellemzésére szükséges mennyiségek. Ennek a kijelentésnek csak perturbációmentes esetben van értelme, hiszen külső perturbáció bekapcsolása esetén a Bloch-függvények nem felelnek meg a rendszer sajátállapotainak. Ha tehát vezetési jelenségeket akarunk tárgyalni,  $\vec{r}$  és  $\vec{k}$  jelentését ebben az esetben is meg kell mondani. A Boltzmann-egyenletben szerepelnek továbbá az  $\vec{r}$  és  $\vec{k}$  koordináták időderívtjai is, amelyeknek meghatározása céljából az elektron dinamikai tulajdonságaival kell foglalkoznunk. Ezzel a problémával már sokan foglalkoztak az irodalomban és a végeredmények teljes egyezésben vannak egymással, de mind a levezetések módszere, mind az érvényességi határ tisztázása erősen kifogásolható.

Lényegében három utat lehet követni a mindháromnak vannak képviselői az irodalomban. A legmodernebb és talán legkorrektebb eljárás [10] a periodikus potenciálterben és külső perturbáló térben mozgó elektron sajátállapotait igyekszik meghatározni. Ebből a célból egy effektív Hamilton-operátort konstruálnak, amelyről megmutatják, hogy a saját-függvényekre való hatása az eredeti Hamilton-operátoréval egyezik meg, így sajátérték probléma szempontjából ezek egymással egyenértékűek. Ez a mértékinvariáns, de rendkívül bonyolult tárgyalás esetünkben nem célravezető, mert nem ad lehetőséget a Bloch-elektronra jellemző  $\vec{r}$  és  $\vec{k}$  koordináták valamilyen általánosítására. A második és harmadik út közös vonása, hogy mindkettő az időtől függő Schrödinger-egyenlet hullámcsomag alakú megoldását keresi. Míg a szerzők egyrésze a hullámcsomagot a konfigurációs térben [11], a másik része a hullámszámvektor terében [12] építi fel. Ezekre a levezetésekre jellemző, hogy egyrészt a kvantummechanikai módszerek sok esetben klasszikus megfontolásokkal keverednek, másrészt a mágneses térerősség négyzetét tartalmazó tagot általában elhagyják és ebből következően a kapott eredmény érvényességi határát erősen korlátozó kijelentéseket tesznek. Nem kívánjuk itt részletes elemzés alá venni az egyes szerzők munkáit, inkább a 2. fejezetben megpróbálunk egy konzekvens kvantummechanikai leírást adni, amely egyben a mágneses térerősség négyzetét sem hanyagolja el. Egyetlen közleményt mégis szeretnénk kiemelni, egyrészt azért, mert gondolatmenete nagyon hasonlít az általunk követethez, másrészt mert jellemző a fent mondottakra. Jones összefoglaló munkájában [13] szintén foglalkozik a szóban forgó problémával és Bloch-függvényekből összeállított hullámcsomag sebességét és gyorsulását vizsgálja. A Hamilton-operátor hatását egy effektív Hamilton-operátorral helyettesíti, azonban nincs megmutatva, hogy Bloch-függvények alkalmazása esetén ezek valóban egyenértékűek-e. Jones a számítások során korrespondencia megfontolásokat is alkalmaz, ami levezetésének félklasszikus jelleget ad. Az érvényességi tartomány becslése során arra a megállapításra jut, hogy a ciklotron frekvencia és a relaxációs idő szorzatának egyenél jóval kisebbnek kell lennie, ami arra engedne következtetni, hogy a ciklotronrezonenciás mérések kiértékelésére az általa kapott eredmény nem alkalmazható, ugyanakkor a gyakorlatban mindenhol ezzel az eredménnyel számolnak. Látni fogjuk, hogy Jones gondolatmenetét követve, de konzekvens kvantummechanikai módszerrel számolva az említett nehézségek eltűnnek.

A relaxációs idővel kapcsolatos problémák már hosszabb megfontolásokat igényelnek. Nyilvánvaló, hogy egy közelítés jogosságát legkényelmesebben úgy lehet eldönteni, ha azt össze lehet hasonlítani az exakt eredménnyel. Ilyen megfontolások alapján a 3. fejezetben megpróbáltuk a Boltzmann-egyenlet megoldását a külső perturbációk, azaz  $\vec{E}$ ,  $\partial T/\partial \vec{r}$  és  $\vec{H}$  szerint haladó sorfejtés alakjában előállítani és próbálkozásunk sikerrel járt, feltételezve, hogy a kapott sorfejtés konvergens, amit nem vizsgáltunk meg.

A bevezetés most következő részében át kellene tekinteni az irodalomban fellelhető megoldási módszereket, de ezek az elsősorban matematikai jellegű, vagy „ad hoc” fizikai megfontolások egy



önálló nagy összefoglaló munka terjedelmét ölelnék fel, így inkább utalunk *Dresden* kiváló dolgozatára [14], aki ezt a munkát már elvégezte. Az egyes szerzők eredményeire, amelyeket fel akarunk használni, vagy amelyek összehasonlítási alapul szolgálnak, természetesen külön hivatkozni fogunk.

A 4. fejezetben az általános eredményeket alkalmazzuk lineáris közelítésben, azaz csak az elektromos térerősségben és hőmérsékletgradiensben elsőrendű tagokat tartjuk meg a sorfejtésből. Eredményeink az irodalomban található összefüggések általánosításainak tekinthetők. Ebben a fejezetben tekintjük át a termoelektromos effektusokat is, ahol a jellemző mennyiségeket tömör, tenzori összefüggések formájában nyerjük.

Az 5. fejezetben tovább lépünk a közelítésben és bár  $\bar{E}$  és  $\partial T/\partial \bar{r}$ -ben továbbra is csak elsőrendű tagokat tartunk meg, a mágneses tér hatását teljes mértékben figyelembe fogjuk venni. Az ebben a fejezetben nyert összefüggések képezik a galvanomágneses, termomágneses és galvano-termomágneses jelenségek tárgyalásának alapját. Az előző fejezethez hasonlóan a tárgyalás itt is teljesen általános és bármilyen szimmetriával rendelkező kristály esetére alkalmazható.

A 6. fejezetben az általános megoldást szem előtt tartva megvizsgáljuk a relaxációs idő közelítés érvényességi tartományának határait. Így feleletet tudunk majd adni arra, hogy az (1.5) alakú Boltzmann-egyenlet jobb oldalán álló ütközési integrál mikor helyettesíthető a

$$\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{\text{ütk.}} = -\frac{f-f_0}{\tau} \quad (1.8)$$

kifejezéssel, azaz mikor vezethető be a  $\tau$  relaxációs idő. Megvizsgáljuk, hogy ennek a helyettesítésnek a lehetősége a kristály speciális tulajdonságaival, vagy azzal van kapcsolatban, hogy a sorfejtésből bizonyos tagokat elhanyagolunk. Az (1.8) összefüggés által meghatározott relaxációs időnél általánosabb relaxációs idő fogalom bevezetésére is van lehetőség, mint arra rá fogunk mutatni, illetve néhány, az irodalomból ismert módszert összehasonlítunk az általunk alkalmazottal. Végül megvizsgáljuk, hogyan egyszerűsödnek a termoelektromos, galvanomágneses, termomágneses és galvano-termomágneses jelenségekre jellemző mennyiségek, ha relaxációs idő bevezetésére van lehetőség. Így többé-kevésbé az irodalomból ismert eredményeket kapjuk vissza, de ugyanakkor pontosan ismerjük ezek érvényességi tartományát.

## 2. A vezetési elektronok dinamikája

Az (1.5) alatt felírt Boltzmann-egyenlet bal oldalán szerepel a helyvektor és hullámszámvektor időderiváltja, amelyeknek meghatározása és értelmezése lesz a fejezet feladata. Értelmezésre azért van szükség, mert külső perturbáció bekapcsolása után a Bloch-függvények már nem írják le sajátállapotot, így a Bloch-függvény független változói nem szerepelhetnek az eloszlásfüggvény argumentumában. Más szóval az  $\bar{r}$  és  $\bar{k}$  változók a hely- és hullámszámvektortól eltérő jellel rendelkeznek.

A levezetés gondolatmenete a következő lesz. A periodikus potenciáltérben és külső perturbáció hatása alatt mozgó elektron  $H$  Hamilton operátorával a  $\psi$  állapotfüggvény időbeli változását leíró

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (2.1)$$

Schrödinger-egyenlet megoldását a következő alakban keressük

$$\psi = \sum_{\bar{k}} c_{\bar{k}}(t) \psi_{\bar{k}}, \quad (2.2)$$

ahol a  $\psi_{\bar{k}}$  függvények Bloch-függvények és feltételezzük, hogy az elektron állapotának leírásához elég egyetlen sávból válogatni a Bloch-függvényeket, azaz a sáv-sáv

átmeneteket elhanyagolhatjuk. A (2.2) megoldás valóban egy hullámcsomagot ír le mind az  $\vec{r}$ , mind a  $\vec{k}$  vektorok terében. E hullámcsomagok középpontját, azaz  $\vec{r}$  várható értékét és  $\vec{k}$  átlagértékét  $\vec{r}_0$  és  $\vec{k}_0$ -val jelöljük. Az eloszlásfüggvény argumentumában ezeknek az átlagértékeknek kell szerepelni és ennek megfelelően az (1.5) alatti Boltzmann-egyenlet bal oldalán  $\vec{r}_0$  és  $\vec{k}_0$  időderiváltja áll. Megjegyezzük itt, hogy az „0” alsó indexet ebben a fejezetben következetesen kiírjuk, de a többi fejezetben elhagyjuk tudomásul véve, hogy mindig a fenti értelemben vett átlagértékekkel számolunk. A (2.2) alatti sorfejtésben szereplő  $c_{\vec{k}}$  együtthatókat konkrétan nem fogjuk meghatározni, de feltételezzük, hogy ezek abszolútérték négyzete  $\vec{k}$  függvényében viszonylag éles maximummal rendelkezik a  $\vec{k}_0$  helyen és így bizonyos várhatóértékeket kényelmesen ki tudunk számolni. Az elektron sebességéhez és gyorsulásához rendelhető operátorokat megkapjuk, ha az időderiváltakat a kvantummechanikai előírásoknak megfelelően kommutátorokkal fejezzük ki:

$$\vec{v} = \dot{\vec{r}} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, \vec{r}], \quad (2.3)$$

$$\vec{a} = \dot{\vec{v}} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, \vec{v}]. \quad (2.4)$$

Ezeknek az operátoroknak a várhatóértéke az elektron fizikailag mérhető tulajdonsága és kétféle módon számíthatók:

$$\langle \vec{v} \rangle = (\psi, \vec{v}\psi) = \frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \dot{\vec{r}}_0; \quad \vec{r}_0 = (\psi, \vec{r}\psi), \quad (2.5)$$

$$\langle \vec{a} \rangle = (\psi, \vec{a}\psi) = \frac{d\langle \vec{v} \rangle}{dt}. \quad (2.6)$$

A kétféle számítás eredményeinek összehasonlítása alapján fogunk következtetni az (1.5) alatti Boltzmann-egyenletben szereplő időderiváltak értékére.

Ezek után írjuk fel a Hamilton-operátort, periodikus potenciáalteret és külső perturbációkat is figyelembe véve [15]:

$$H = H_0 + H_1, \quad (2.7)$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}), \quad (2.8)$$

$$H_1 = \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A} \nabla + \frac{i\hbar e}{2mc} \text{div } \vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + eU, \quad (2.9)$$

ahol  $V(\vec{r})$  a periodikus teret jellemző potenciál,  $U(\vec{r}, t)$  és  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  a külső elektromágneses perturbációra jellemző skalár- és vektorpotenciál, továbbá az állandókat a szokásos módon jelöltük. A Boltzmann-egyenlettel kapcsolatos megfontolásaink kizárólag térben és időben állandó elektromos és mágneses terek esetére fognak vonatkozni, jelen fejezetben azonban még megengedjük, hogy a terek időben vál-



tozzanak. Ilyen feltételek mellett a vektor-, illetve skálarpotenciál a következő lehet:

$$\bar{A}(\bar{r}, t) = \frac{1}{2} \bar{H}(t) \times (\bar{r} - \bar{l}(t)), \quad (2.10)$$

$$U(\bar{r}, t) = - \left\{ \bar{E}_h(t) - \frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial t} [\bar{H}(t) \times \bar{l}(t)] \right\} \cdot \bar{r}, \quad (2.11)$$

ahol  $\bar{l}(t)$  egyelőre határozatlan, térben homogén vektor és  $\bar{E}_h$ -val az elektromos térnek a térben homogén komponensét jelöltük, ugyanis a mágneses térnek az időbeli változása az elektromos térhez inhomogén járulékot is ad. Az elektrodinamikából ismert összefüggések alapján valóban

$$\bar{H} = \text{rot } \bar{A} = \bar{H}(t), \quad (2.12)$$

$$\bar{E} = -\text{grad } U - \frac{1}{c} \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = \bar{E}_h(t) - \frac{1}{2c} \frac{\partial \bar{H}}{\partial t} \times \bar{r}. \quad (2.13)$$

Mielőtt a (2.3) és (2.4) alatt kijelölt kommutátorokat kiszámítanánk, egy tételt említünk, amelyre Slater hívta fel a figyelmet [16] először: Legyen  $g(\bar{k})$  periodikus függvény, akkor fennáll a következő összefüggés:

$$g(\bar{k}) \psi_{\bar{k}} = g(-i\bar{\nabla}) \psi_{\bar{k}}, \quad (2.14)$$

ahol  $\psi_{\bar{k}}$  természetesen Bloch-függvény. A tétel igazolása rendkívül egyszerű, ha mindkét oldalon a  $g$ -függvényt sorbafejtjük és kihasználjuk a Bloch-függvény alakot. A bizonyítás e módjából következik, hogy a tétel csak egyértékű  $g$ -függvények esetére érvényes, így például a periodikus potenciáltérben mozgó elektron esetében a

$$H_0 \psi_{\bar{k}} = E(\bar{k}) \psi_{\bar{k}} \quad (2.15)$$

stacioner Schrödinger-egyenlet helyett csak egy sávon belül alkalmazható a

$$H_0 \psi_{\bar{k}} = E(-i\bar{\nabla}) \psi_{\bar{k}} = E(\bar{k}) \psi_{\bar{k}} \quad (2.16)$$

átírás. Mi azonban egy-sáv vezetésre korlátozzuk magunkat, így ezt az átírást minden további nélkül alkalmazni fogjuk. A tétel további következményeit egy  $G$  operátorra vonatkozóan fogalmazzuk meg, amely önadjungált, a  $H_0$  operátorral felcserélhető, tehát közös sajátfüggvény rendszerük van és sajátértékei a  $g(\bar{k})$  mennyiségek, azaz

$$G \psi_{\bar{k}} = g(\bar{k}) \psi_{\bar{k}}. \quad (2.17)$$

Ilyen típusú operátorok várhatóértékeinek kiszámítására hasznos lesz a következő két összefüggés, amely az önadjungáltság és a (2.14) alatt megfogalmazott tétel közvetlen következménye:

$$(\varphi, G \psi_{\bar{k}}) = (\varphi, g(-i\bar{\nabla}) \psi_{\bar{k}}) = g(\bar{k}) (\varphi, \psi_{\bar{k}}), \quad (2.18)$$

$$(\psi_{\bar{k}}, G \varphi) = (G \psi_{\bar{k}}, \varphi) = (g(-i\bar{\nabla}) \psi_{\bar{k}}, \varphi) = g(\bar{k}) (\psi_{\bar{k}}, \varphi). \quad (2.19)$$

Írjuk most fel a (2.7) alatt jelölt Hamilton-operátort figyelembe véve azt, hogy ennek segítségével (2.3) és (2.4) típusú kommutátorokat, majd (2.5) és (2.6) típusú várhatóértéket kívánunk kiszámítani, tehát (2.18) és (2.19)-re való tekintettel a  $H_0$  operátor helyett mindig a (2.16) alatti átírást alkalmazzuk. Vegyük észre még, hogy a (2.10) alatt adott vektorpotenciál divergenciája eltűnik és így a Hamilton-operátor:

$$H = E(-i\bar{\nabla}) + \frac{i\hbar e}{mc} \bar{A}\bar{\nabla} + \frac{c^2}{2mc^2} \bar{A}^2 + eU. \quad (2.20)$$

Ennek segítségével a (2.3) alatti sebesség operátor így írható, ha figyelembe vesszük az A. függelékben kiszámított kommutátorokat, valamint azt, hogy  $\bar{r}$  explicite nem függ az időtől

$$\bar{v} = \frac{i}{\hbar} \left\{ [E(-i\bar{\nabla}), \bar{r}] + \frac{i\hbar e}{mc} [\bar{A}\bar{\nabla}, \bar{r}] \right\} = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{\partial E}{\partial \bar{k}} \right)_{\bar{k}=-i\bar{\nabla}} - \frac{e}{mc} \bar{A}. \quad (2.21)$$

Ez az eredmény magában foglalja a perturbálatlan periodikus potenciáltérben mozgó elektron, azaz a Bloch-elektron esetét is, ekkor nyilvánvalóan  $\bar{A}=0$ . Ebben az esetben az elektron állapotát nem valamilyen hullámcsomag, hanem egy Bloch-függvény írja le, így a  $\bar{k}$  állapotú elektron sebességének várhatóértéke:

$$\langle \bar{v} \rangle_{\bar{k}} = \frac{1}{\hbar} \left( \psi_{\bar{k}}, \left( \frac{\partial E}{\partial \bar{k}} \right)_{\bar{k}=-i\bar{\nabla}} \psi_{\bar{k}} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \bar{k}}, \quad (2.22)$$

ahol figyelembe vettük a (2.14) összefüggést és azt, hogy a Bloch-függvények ortonormáltak. Perturbált esetben általában a vektorpotenciált tartalmazó tag is ad járulékot és a várhatóértékképzést a (2.2) alakú hullámcsomagokkal kell végrehajtunk. Ekkor a sebesség várhatóértéke

$$\langle \bar{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \sum_{\bar{k}, \bar{k}'} c_{\bar{k}}^* c_{\bar{k}'} \left( \psi_{\bar{k}}, \left( \frac{\partial E}{\partial \bar{k}} \right)_{\bar{k}=-i\bar{\nabla}} \psi_{\bar{k}'} \right) - \frac{e}{mc} \langle \bar{A} \rangle. \quad (2.23)$$

Szeretnénk, hogy a hullámcsomaggal leírt elektron — amennyire lehet — Bloch-elektronhoz hasonló tulajdonságokkal rendelkezzen. Ezt úgy fogjuk elérni, hogy a mérték-invariáns tárgyalás helyett célszerűen választott mértékben dolgozunk tovább. A (2.22) és (2.23) sebesség várhatóértékek összehasonlítása alapján kézenfekvő, hogy olyan mérték választása a legcélszerűbb, amelyben

$$\langle \bar{A} \rangle = \frac{1}{2} \bar{H} \times (\langle \bar{r} \rangle - \bar{l}(t)) = 0. \quad (2.24)$$

Ez annyit jelent, hogy a vektorpotenciál (2.10) kifejezésében határozatlanul hagyott  $\bar{l}(t)$  vektort az elektron pillanatnyi helyvektorának választjuk, azaz a mértékünk időről időre változik és pedig úgy, hogy az elektron legvalószínűbb tartózkodási helyén a vektorpotenciál mindig zérus. Ezzel elértük azt, hogy az elektron tulajdonságait leíró kifejezésekben — mint pl. sebesség, vagy energia — a vektorpotenciált tartalmazó tagok zérus, vagy minimális járulékot adjanak. A mértékválasztás



természetesen nem befolyásolja a fizikai mérésekkel ellenőrizhető végeredményeket, hiszen kezdetben helyes, mértékinvariáns egyenletekből indultunk ki. Különböző mértékek esetén a hullámfüggvény fázisa különböző és a várhatóértékek képzése során a vektorpotenciál-operátort tartalmazó tagok több-kevesebb szerephez jutnak. Az általunk választott mérték esetén ez a szerep minimális, a vektorpotenciállal kapcsolatos információ a hullámfüggvény fázisába van maximálisan beépítve. Ebben az esetben tehát a vektorpotenciál (2.10) helyett konkrétan

$$\bar{A}(\bar{r}, t) = \frac{1}{2} \bar{H}(t) \times (\bar{r} - \bar{r}_0(t)); \quad \bar{r}_0 = \langle \bar{r} \rangle \quad (2.25)$$

és a sebesség várhatóértéke (2.23)-ból

$$\langle \bar{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \sum_{\bar{k}} |c_{\bar{k}}|^2 \frac{\partial E}{\partial \bar{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\bar{k}_0)}{\partial \bar{k}_0}, \quad (2.26)$$

ahol ismét felhasználtuk a (2.14) összefüggést, valamint a Bloch-függvények ortonormalitási tulajdonságát. Az egyenlőség második része abból következik, hogy feltételeztük  $|c_{\bar{k}}|^2$  éles maximumát a  $\bar{k}_0$  helyen, illetve a szorzóként álló függvény sima voltát. Jelen esetben, amikor még más átlagértékek nem szerepelnek, a (2.26) összefüggést  $\bar{k}_0$  definíciójának is lehetne tekinteni. Meg kell még jegyeznünk, hogy az alkalmazott mértékválasztás Jones és Zener nevéhez fűződik [12], bár dolgozatukban világosan nem lehet látni a speciális mértékválasztás indokoltságát.

Térjünk most át a gyorsulás operátorának meghatározására, azaz állítsuk elő a (2.4) kifejezést (2.20) és (2.21) figyelembevételével. A sebesség-operátor már nem független explicit az időtől, éspedig a (2.25) összefüggést felhasználva

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\frac{e}{mc} \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = -\frac{e}{2mc} \left\{ \frac{\partial \bar{H}}{\partial t} \times (\bar{r} - \bar{r}_0) - \bar{H} \times \dot{\bar{r}}_0 \right\}. \quad (2.27)$$

Ezzel és az A. függelékben kiszámított kommutátorok segítségével a gyorsulás-operátor a következő egyszerű alakban írható fel:

$$\begin{aligned} \bar{a} = & -\frac{e}{mc} \frac{d\bar{A}}{dt} + \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \bar{k}^2} \right)_{\bar{k}=-i\bar{v}} \langle \bar{F}_L \rangle + \\ & + \frac{e}{4\hbar^2 c} \left\{ \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \bar{k}^2} \right)_{\bar{k}=-i\bar{v}} [(\bar{v} - \langle \bar{v} \rangle) \times \bar{H}] + \text{adj.} \right\}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

ahol a vektorpotenciál teljes időderiváltjával a következő kifejezést jelöltük:

$$\frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial \bar{H}}{\partial t} \times (\bar{r} - \bar{r}_0) + \bar{H} \times (\bar{v} - \langle \bar{v} \rangle) \right\} = \frac{d\bar{A}}{dt}. \quad (2.29)$$

Továbbá a (2.12) és (2.13) összefüggéseket figyelembe véve az  $\bar{F}_L$  jelölést az

$$\bar{F}_L = e\bar{E} + \frac{e}{c} \bar{v} \times \bar{H} \quad (2.30)$$

Lorentz-erőre vezettük be. Természetesen az  $E(\vec{k})$  függvény második deriváltja tenzor jellegű mennyiség a (2.28) kifejezésben.

A gyorsulás-operátor várhatóértékét a B. függelékben számítottuk ki és eredményül kaptuk a következőt:

$$\langle \vec{a} \rangle = \bar{M}^{-1} \langle \vec{F}_L \rangle + 0(\Delta \vec{k}), \quad (2.31)$$

ahol

$$\bar{M}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}_0^2} \quad (2.32)$$

az effektív-tömeg-tenzor reciproka. Megbecsültük az elektront reprezentáló hullámcsomag  $\vec{k}$ -térbeni szélességétől függő maradéktagot is skalár effektív tömeget feltételezve és a következőt kaptuk:

$$0(\Delta \vec{k}) \equiv \left( \frac{\partial M^{-1}}{\partial \vec{k}_0} \langle \Delta \vec{k} \rangle \right) \langle \vec{F}_L \rangle \left( 1 + \frac{\omega \tau}{4} \right) + \frac{e\hbar}{4c} (M^{-1})^2 [\langle \Delta \vec{k} \rangle \times \vec{H}]. \quad (2.33)$$

Látható, hogy a maradéktag zérussá válna, ha a hullámcsomag  $\delta$ -függvény alakú lenne. Érdekes megemlíteni, hogy Jones a következő feltételt adta [13] a maradéktag elhanyagolhatóságára:

$$\omega \tau \ll 1 \quad (2.34)$$

ahol  $\omega$  a (B.20) alatt adott Larmor-frekvencia és  $\tau$  az átlagos ütközési idő. A (2.33) kifejezésből nyilvánvaló, hogy ez csupán annak a feltétele, hogy a maradéktagon belül az első tag egy része, annak másik részéhez viszonyítva kicsi, és semmi köze sincs ahhoz a feltételhez, amely szerint a maradéktag elhanyagolható. Ez azért volt lényeges megjegyzés, mert a bemutatott számítás végeredményét a ciklotronrezonancias mérések kiértékelése során gyakran felhasználják, holott nyilvánvaló, hogy ezek a kísérletek csak akkor lehetnek eredményesek, ha a (2.34) egyenlőtlenség fordított irányú.

Feltételezve most már, hogy a (2.31) összefüggésben a maradéktag elhanyagolható, számítsuk ki a gyorsulás várhatóértékét a (2.26) összefüggésből kiindulva:

$$\langle \vec{a} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}_0^2} \dot{\vec{k}}_0 = \bar{M}^{-1} \dot{\hbar \vec{k}}_0. \quad (2.35)$$

Ezt összehasonlítva a (2.31) kifejezéssel végeredményben kapjuk, hogy

$$\hbar \dot{\vec{k}}_0 = \langle \vec{F}_L \rangle. \quad (2.36)$$

Jelen fejezetben sikerült értelmeznünk a Boltzmann-egyenlet független változóit és azok idő szerinti differenciálhányadosát is meghatároztuk. Az alkalmazott levezetés érdemének elsősorban az tekinthető, hogy a mágneses térben magasabb rendű tagokat is következetesen figyelembe veszi és az elhanyagolt tagokra olyan kifejezést ad, amelyek korrekt nagyságrendi becsléseket tesznek lehetővé. Itt kell megemlítenünk a közelmúltban megjelent [17] közleményt, amely igen elegáns kvantummechanikai módszerekkel jut el a végeredményhez, de éppen az elhanyagolásokról nem mond semmit.



## 3. A Boltzmann-egyenlet megoldása

A bevezetésben felírt Boltzmann-féle transzport-egyenlet megoldását fogjuk előállítani a külsőleg beállított perturbációk szerint haladó sor formájában. Ezek a perturbációk a térben és időben homogén  $\vec{E}$  elektromos tér,  $\partial T / \partial r$  hőmérsékleti gradiens és  $\vec{H}$  mágneses tér. Az előző fejezet eredményeit figyelembe véve, az (1.5) alatti Boltzmann-egyenletet így írhatjuk fel:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \bar{v} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \bar{v} \times \vec{H} \right) \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = I, \quad (3.1)$$

ahol  $I$ -vel a következő ütközési integrált jelöltük:

$$I = \frac{V}{8\pi^3} \int \{ W(\vec{k}', \vec{k}) f' (1-f) - W(\vec{k}, \vec{k}') f (1-f') \} d^3 \vec{k}' \quad (3.2)$$

és a sebesség is kifejezhető a  $\vec{k}$  hullámszámvektor függvényeként

$$\bar{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}. \quad (3.3)$$

A kristályra jellemző  $W(\vec{k}, \vec{k}')$  átmeneti valószínűségekre és  $E(\vec{k})$  energia-hullámszámvektor összefüggésre vonatkozóan semmiféle megszorítást nem teszünk, csupán azt követeljük meg, hogy a kristály szabályos szerkezetéből következő szimmetria tulajdonságoknak tegyenek eleget [18], amelyek a következők:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(-\vec{k}, -\vec{k}'), \quad (3.4)$$

$$E(\vec{k}) = E(-\vec{k}). \quad (3.5)$$

A (3.2) ütközési integrált egyszerűbb alakban írhatjuk, ha figyelembe vesszük a mikroszkopikus reverzibilitás elvét, amely szerint a mikroszkopikus folyamatok megfordíthatók. Így tehát egyensúlyi állapotban, amelynek eloszlási függvénye a Fermi–Dirac-függvény, a  $\vec{k}$  állapotból ugyanannyi elektron szóródik a  $\vec{k}'$  állapotba, mint viszont. Ennek következtében a (3.2) alatti integrandusznak el kell tűnnie egyensúlyi helyzetben és ez lehetőséget ad egy  $V(\vec{k}, \vec{k}')$  szimmetrizált átmeneti valószínűség bevezetésére a következő módon:

$$W(\vec{k}', \vec{k}) f'_0 (1-f_0) = W(\vec{k}, \vec{k}') f_0 (1-f'_0) = V(\vec{k}, \vec{k}'). \quad (3.6)$$

Ebből a definiáló összefüggésből közvetlenül következik, hogy  $V(\vec{k}, \vec{k}')$  a változók felcserélésére érzéketlen, azaz

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = V(\vec{k}', \vec{k}), \quad (3.7)$$

továbbá (3.4), (1.7) és (3.5) következménye, hogy változóiban egyszerre páros függvény, azaz

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = V(-\vec{k}, -\vec{k}'). \quad (3.8)$$

A (3.7) és (3.8) szimmetria tulajdonságok alapvető szerepet játszanak a Boltzmann-egyenlet általunk adott megoldási módszerében. A (3.2) ütközési integrál (3.6) segítségével a következő alakban írható

$$I = \frac{V}{8\pi^3} \int V(\bar{k}, \bar{k}') \left\{ \frac{f'}{f_0'} \cdot \frac{1-f}{1-f_0} - \frac{f}{f_0} \cdot \frac{1-f'}{1-f_0'} \right\} d^3 \bar{k}'. \quad (3.9)$$

Célszerű lesz a következő lépésként az  $f(\bar{r}, \bar{k})$  eloszlásfüggvény helyett új változót bevezetni a következő összefüggés szerint:

$$f(\bar{r}, \bar{k}) = f_0 + \varphi(\bar{r}, \bar{k}) = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi(\bar{r}, \bar{k}). \quad (3.10)$$

A helyettesítés nyilván olyan gondolat alapján történt, hogy a perturbáció hatását leválasszuk, illetve továbbmenően feltételezzük, hogy ez a hatás a Fermi-energia közelében jelentős, így a  $\partial f_0 / \partial E$  éles maximummal rendelkező és sima  $\Phi(\bar{r}, \bar{k})$  függvény szorzataként írható. Természetesen az új változók bevezetése, amelyeket egyformán fogunk használni a továbbiakban, semmiféle megszorítást nem jelent és csupán a számítások megkönnyítését szolgálja. A (3.10)-ben szereplő differenciáhányados (1.7) alapján könnyen kiszámítható:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{f_0(1-f_0)}{kT}. \quad (3.11)$$

Az új változó meghatározására szolgáló integro-differenciálegyenlet a következő:

$$\bar{v} \left( \frac{\partial f_0}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{e}{\hbar} \left( \bar{E} + \frac{1}{c} \bar{v} \times \bar{H} \right) \left( \frac{\partial f_0}{\partial \bar{k}} + \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{k}} \right) = I, \quad (3.12)$$

ahol az ütközési integrál most

$$I = \frac{V}{8\pi^3 kT} \int V(\bar{k}, \bar{k}') \left\{ (\Phi - \Phi') - \frac{f_0 - f_0'}{kT} \Phi \Phi' \right\} d^3 \bar{k}'. \quad (3.13)$$

A (3.13) egyenletben vegyük észre, hogy a  $\Phi \Phi'$  szorzat, amely non-lineárisá teszi az integro-differenciálegyenletet, a Pauli-féle kizárási elv következménye és klaszszikus tárgyalás esetén, amikor a Boltzmann-féle eloszlásfüggvény reprezentálná az egyensúlyi helyzetet, ez a tag nem lépne fel. Félvezetők tárgyalása esetén bizonyos közelítésekben éppen ezért el is lehet hagyni.

A (3.12) egyenletet tovább alakíthatjuk, ha (1.7) alapján kiszámítjuk  $f_0$  deriváltjait

$$\frac{\partial f_0}{\partial \bar{r}} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \left( \frac{E - \zeta}{T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial \zeta}{\partial \bar{r}} \right), \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \bar{k}} = \hbar \bar{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (3.15)$$

és figyelembe vesszük, hogy kezdetben homogén anyagot tételeztünk fel, tehát az egyes függvények az  $\bar{r}$  helyvektortól csak a  $T$  hőmérsékleten keresztül függenek.



Ekkor (3.12) az ütközési integrált is kiírva ilyen alakú:

$$\begin{aligned} & \bar{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ e \bar{E} - \left( \frac{E - \zeta}{T} + \frac{\partial \zeta}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} \right] + \bar{v} \frac{\partial \varphi}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} + \\ & + \frac{e}{\hbar} \left( \bar{E} + \frac{1}{c} \bar{v} \times \bar{H} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{k}} = \frac{V}{8\pi^3 kT} \int V(\bar{k}, \bar{k}') \left\{ (\Phi - \Phi') - \frac{f_0 - f'_0}{kT} \Phi \Phi' \right\} d^3 \bar{k}'. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Ennek az egyenletnek a megoldását keressük a perturbációk szerint haladó sorfejtés alakjában. Foglalkozunk össze a perturbációkat egy 9 komponensű  $\hat{F}$  vektorba

$$\hat{F} = \left[ \bar{E}_0, \frac{\partial T_0}{\partial \bar{r}}, \bar{H}_0 \right], \quad (3.17)$$

ahol a komponensek mind erő dimenziójúak, mert

$$\bar{E}_0 = e \bar{E}, \quad T_0 = kT, \quad \bar{H}_0 = e \bar{H}. \quad (3.18)$$

Az ismeretlen függvényeket  $\hat{F}$  szerint fejtjük sorba:

$$\Phi = \sum_{N=1}^{\infty} \hat{\Phi}_N(\bar{r}, \bar{k}) \hat{F}^N, \quad (3.19)$$

vagy

$$f = \sum_{N=0}^{\infty} \hat{\varphi}_N(\bar{r}, \bar{k}) \hat{F}^N; \quad \hat{\varphi}_0 = f_0, \quad (3.20)$$

ahol természetesen a sorfejtési együtthatók között (3.10) alapján fennáll a következő kapcsolat:

$$\hat{\varphi}_N = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hat{\Phi}_N, \quad N \neq 0. \quad (3.21)$$

A  $\hat{\Phi}_N$ , illetve  $\hat{\varphi}_N$  sorfejtési együtthatók  $9^N$  komponenst tartalmazó négyzetes mátrixok és az  $\hat{F}^N$  jelölés azt jelenti, hogy az általánosított kilences erőt  $N$ -szer egymásután kell írni és az előttük álló mártix szukcesszív hat az erőkre a mátrixszorzás szabályai szerint a következő módon:

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_N \hat{F} &= \hat{\chi}_{N-1}; \quad \hat{\chi}_{N-1}^{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}} = \sum_{i=1}^9 \hat{\Phi}_N^{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}, i} \hat{F}_i, \\ \hat{\Phi}_N \hat{F}^2 &= \hat{\chi}_{N-1} \hat{F}, \dots, \hat{\Phi}_N \hat{F}^N = \text{skalár}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

A (3.19) és (3.20) sorokat a (3.16) egyenletbe helyettesítve a következő egyenletet kapjuk, amelyben a  $\partial \hat{\varphi}_N / \partial T$  mátrix elemei a  $\partial \hat{\Phi}_N^{j_1, \dots, j_N} / \partial T$  skalárok és a  $\partial \hat{\varphi}_N / \partial \bar{k}$  mátrix elemei a  $\partial \hat{\Phi}_N^{j_1, \dots, j_N} / \partial \bar{k}$  hármas vektorok,

$$\begin{aligned} & \bar{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ \bar{E}_0 - \left( \frac{E - \zeta}{T_0} + \frac{\partial \zeta}{\partial T_0} \right) \frac{\partial T_0}{\partial \bar{r}} \right] + \sum_{N=1}^{\infty} \left( \bar{v} \frac{\partial T_0}{\partial \bar{r}} \frac{\partial \hat{\varphi}_N}{\partial T_0} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{\hbar} \bar{E}_0 \frac{\partial \hat{\varphi}_N}{\partial \bar{k}} - \frac{1}{\hbar c} \bar{H}_0 \cdot \left[ \bar{v} \times \frac{\partial \hat{\varphi}_N}{\partial \bar{k}} \right] \right) \hat{F}^N = \\ & = \frac{V}{8\pi^3 T_0} \int V(\bar{k}, \bar{k}') \left\{ \sum_{N=1}^{\infty} (\hat{\Phi}_N - \hat{\Phi}'_N) \hat{F}^N - \frac{f_0 - f'_0}{T_0} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{M=1}^{\infty} \hat{\Phi}_N \hat{\Phi}'_M \hat{F}^{N+M} \right\} d^3 \bar{k}'. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ez az egyenlet sokkal egyszerűbb alakban írható, ha bevezetjük a következő mátrixot

$$\hat{A}_N = \frac{8\pi^3 T_0}{V} \hat{\Psi} \cdot \hat{\varphi}_{N-1}, \quad (3.24)$$

ahol  $\hat{\Psi}$  9 komponensű sor-mátrix alakú differenciál operátor

$$\hat{\Psi} = \left[ \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \bar{k}}, \bar{v} \frac{\partial}{\partial T_0}, -\frac{1}{\hbar^2 c} \bar{\omega} \right] \quad (3.25)$$

és itt

$$\bar{\omega} = \hbar \bar{v} \times \frac{\partial}{\partial \bar{k}}. \quad (3.26)$$

Behelyettesítéssel könnyen verifikálható, hogy (3.23) egyszerűen így írható:

$$\begin{aligned} \sum_{N=1}^{\infty} \hat{A}_N \hat{F}^N &= \int V(\bar{k}, \bar{k}') \left\{ \sum_{N=1}^{\infty} (\hat{\Phi}_N - \hat{\Phi}'_N) \hat{F}^N - \right. \\ &\quad \left. - \frac{f_0 - f'_0}{T_0} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{M=1}^{\infty} \hat{\Phi}_N \hat{\Phi}'_M \hat{F}^{N+M} \right\} d^3 \bar{k}'. \end{aligned} \quad (3.27)$$

A könnyebb áttekintés céljából felírjuk az  $A_N$  mátrix néhány elemét, például

$$\begin{aligned} \hat{A}_N^{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}, 5} &= \frac{8\pi^3 T_0}{V} \bar{v}_y \frac{\partial \hat{\varphi}_{N-1}^{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}}}{\partial T_0}, \\ \hat{A}_N^{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}, 9} &= -\frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{1}{\hbar c} \left( \bar{v} \times \frac{\partial \hat{\varphi}_{N-1}^{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}}}{\partial \bar{k}} \right)_z. \end{aligned} \quad (3.28)$$

A (3.27) egyenlet már alkalmas arra, hogy a sorfejtéses megoldási módszer szokásos lépéseit alkalmazzuk. A különböző hatványon szereplő általánosított kilences erők egymástól lineárisan függetlenek, továbbá a sorfejtési együtthatók függetlenek a kilences erőktől, így ahhoz, hogy a (3.27) egyenlet kielégüljön az azonos kitevőjű  $\hat{F}^N$  együtthatóinak összege kell, hogy zérussal legyen egyenlő. Ebből következik, hogy

$$\int V(\bar{k}, \bar{k}') (\hat{\Phi}_N - \hat{\Phi}'_N) d^3 \bar{k}' = \hat{A}_N + \frac{1}{T_0} \int V(\bar{k}, \bar{k}') (f_0 - f'_0) \sum_{p=1}^{N-1} \hat{\Phi}_p \hat{\Phi}'_{N-p} d^3 \bar{k}'. \quad (3.29)$$

Ez a mátrix-egyenlet a  $\hat{\Phi}_N$  mátrixok elemeinek meghatározására csak egy lehetőség, de nyilván ugyanilyen jó megoldást kapunk, ha például  $\hat{\Phi}_2^{12}$  és  $\hat{\Phi}_2^{21}$  elemek helyett új  $(\hat{\Phi}_2^{12})_{\text{új}} = (\hat{\Phi}_2^{21})_{\text{új}} = (\hat{\Phi}_2^{12} + \hat{\Phi}_2^{21})/2$  mátrixelemeket vezetünk be. Ilyen jellegű szimmetrizálásokat nem fogunk végezni.

Vegyük észre, hogy  $N=1$  esetére a (3.29) egyenlet jobb oldalán csak ismert függvények szerepelnek és így  $\hat{\Phi}_1$  meghatározható.  $N>1$  esetére mind az összegezésen, mind  $\hat{A}_N$ -en keresztül különböző  $\hat{\Phi}_p$  mátrixok szerepelnek az egyenlet



jobb oldalán, de mindezekre  $P < N$  és így már az előző lépésekben meghatároztuk azokat. Szerencsére nem kell ezt a fáziságos iterációs módszert követni olyan értelemben, hogy minden  $N$ -re megoldjuk a (3.29) integrálegyenletet, hanem — mint mindjárt látni fogjuk — annak megoldását általánosan fel tudjuk írni bármilyen  $N$ -re.

Jelöljük  $V(\bar{k})$ -val a szimmetrizált átmeneti valószínűség integrálját, azaz

$$\int V(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' = V(\bar{k}) \quad (3.30)$$

és legyen  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  a (3.29) egyenlet Green-függvénye, amely kielégíti a következő

$$V(\bar{k})\gamma(\bar{k}, \bar{k}') - \int V(\bar{k}, \bar{k}'')\gamma(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' = \delta(\bar{k} - \bar{k}') - \frac{1}{\Theta_B} \quad (3.31)$$

integrálegyenletet, ahol  $\Theta_B$  a Brillouin-zóna térfogata. A (3.29) inhomogén egyenlet megoldását a Green-függvény segítségével egyszerűen felírhatjuk:

$$\hat{\Phi}_N = \int \left\{ \hat{A}'_N + \frac{1}{T_0} \int V(\bar{k}', \bar{k}'') (f''_0 - f''_0) \sum_{p=1}^{N-1} \hat{\Phi}'_p \hat{\Phi}''_{N-p} d^3 \bar{k}'' \right\} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}', \quad (3.32)$$

amiről behelyettesítéssel könnyen meggyőződhetünk.

Ezzel a Boltzmann-egyenlet megoldására vonatkozó feladatot formálisan meg is oldottuk. Azért formálisan, mert a (3.31) alatti integrálegyenlet általános megoldását nem állítottuk elő. Ez a feladat rendkívül nehéz és — véleményünk szerint — adott átmeneti valószínűségek esetén „ad hoc” módszerekkel kell próbálkozni. Itt jegyezzük meg és a C. függelékben be is bizonyítjuk, hogy a (3.29) alakú Fredholm-típusú integrálegyenletek szokásos iterációs megoldási módszere jelen esetben nem konvergens és ezért itt nem alkalmazható. (Külön köszönetet mondok ezen a helyen Zawadowski Alfréd munkatársamnak ezért a szóbeli észrevételért.)

Tekintsük át röviden a Boltzmann-egyenlet megoldásával kapcsolatos eddigi eredményeinket. A megoldást a (3.19) alatti sor alakjában kapjuk, ahol a sorfejtési együtthatókat a (3.32) összefüggés alapján lépcsőről lépésre határozott integrálok formájában állíthatjuk elő. Eddigi megfontolásaink teljesen általánosak voltak, a kristályra jellemző energia-hullámszámvektor függvényre és átmeneti valószínűségekre semmilyen megszorítást nem tettünk. Ha konkrét kristály esetén ezek a függvények ismeretesek, akkor a (3.31) alatti, viszonylag egyszerű típusú integrálegyenlet megoldása után az említett határozott integrálok kiszámíthatók. Ahelyett, hogy konkrét kristályokra vonatkozó feladatok megoldására szentelnénk a figyelmet, további általános következtetéseket vonhatunk le, ha figyelembe vesszük a (3.31) egyenlet által definiált Green-függvények, illetve a (3.32) alatti megoldás néhány tulajdonságát, amelyek függetlenek a kristályra jellemző függvények konkrét alakjától és a (3.5), (3.7), ill. (3.8) szimmetria relációkból következnek.

Mielőtt megfogalmaznánk a szóban forgó tulajdonságokat, válasszuk le a Green-függvény szinguláris részét és ezáltal vezessünk be egy új  $\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényt

$$\gamma(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{\delta(\bar{k} - \bar{k}') + \Gamma(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})}. \quad (3.33)$$

Ezt a (3.31) egyenletbe helyettesítve a következő integrálegyenletet kapjuk

$$\Gamma(\bar{k}, \bar{k}') - \int \frac{V(\bar{k}, \bar{k}'')}{V(\bar{k}'')} \Gamma(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' = \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} - \frac{1}{\Theta_B}, \quad (3.34)$$

amely tehát már nem szinguláris és így bizonyos értelemben könnyebben kezelhető.

Most az említett tulajdonságokat három lemmában fogalmazzuk meg, amelyeknek a bizonyítását a D. függelékben adjuk.

1. *Lemma:* A  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  Green-függvény is rendelkezik a szimmetrizált valószínűség (3.7) és (3.8) szimmetria tulajdonságaival, azaz

$${}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}') = {}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k}) \quad \text{és} \quad \gamma(\bar{k}, \bar{k}') = \gamma(-\bar{k}, -\bar{k}'). \quad (3.35)$$

Ahol a baloldali indexek jelentése mindjárt világos lesz. Először is, ha bármilyen  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  függvény kielégíti a

$$G(\bar{k}, \bar{k}') = G(-\bar{k}, -\bar{k}') \quad (3.36)$$

szimmetria relációt, akkor felbontható egy mindkét változójában páros és egy mindkét változójában páratlan függvény összegére, azaz („e” = even = páros, „o” = odd = páratlan)

$$G(\bar{k}, \bar{k}') = {}_eG(\bar{k}, \bar{k}') + {}_oG(\bar{k}, \bar{k}'), \quad (3.37)$$

ahol

$$\begin{aligned} {}_eG(\bar{k}, \bar{k}') &= {}_eG(-\bar{k}, \bar{k}') = {}_eG(\bar{k}, -\bar{k}') = {}_eG(-\bar{k}, -\bar{k}'), \\ {}_oG(\bar{k}, \bar{k}') &= -{}_oG(-\bar{k}, \bar{k}') = -{}_oG(\bar{k}, -\bar{k}') = {}_oG(-\bar{k}, -\bar{k}'). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Bizonyításként megadjuk a konkrét felbontást

$$\begin{aligned} {}_eG(\bar{k}, \bar{k}') &= \frac{1}{4} \{G(\bar{k}, \bar{k}') + G(-\bar{k}, \bar{k}') + G(\bar{k}, -\bar{k}') + G(-\bar{k}, -\bar{k}')\}, \\ {}_oG(\bar{k}, \bar{k}') &= \frac{1}{4} \{G(\bar{k}, \bar{k}') - G(-\bar{k}, \bar{k}') - G(\bar{k}, -\bar{k}') + G(-\bar{k}, -\bar{k}')\}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

A (3.35), illetve (3.8) szimmetria tulajdonságok értelmében a Green-függvény, illetve szimmetrizált átmeneti valószínűség is páros és páratlan függvények összegére bontható

$$\gamma(\bar{k}, \bar{k}') = {}_e\gamma(\bar{k}, \bar{k}') + {}_o\gamma(\bar{k}, \bar{k}'), \quad (3.40)$$

$$V(\bar{k}, \bar{k}') = {}_eV(\bar{k}, \bar{k}') + {}_oV(\bar{k}, \bar{k}'). \quad (3.41)$$

Ezek a tulajdonságok hasznosnak fognak bizonyulni bizonyos integrálok kiszámítása során. Így például a szimmetrizált átmeneti valószínűség

$$\int V(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' = V(\bar{k}) = V(-\bar{k}) \quad (3.42)$$

integráljáról rögtön látható, hogy páros függvény, hiszen (3.41)-ből  ${}_oV(\bar{k}, \bar{k}')$  integrálja zérus a Brillouin-zónára vonatkozó periodicitás miatt. A  $V(\bar{k})$  függvény



páros voltából, a (3.35) szimmetria tulajdonságokból és a (3.33) definiáló egyenletből közvetlenül következik, hogy

$$\frac{{}_0\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})} = \frac{{}_0\Gamma(\bar{k}', \bar{k})}{V(\bar{k}')} \quad \text{és} \quad \Gamma(\bar{k}, \bar{k}') = \Gamma(-\bar{k}, -\bar{k}'). \quad (3.43)$$

A következő lemmák a  $\hat{\Phi}_N$  sorfejtési együtthatókra vonatkoznak. Állapodjunk meg abban, hogy most a mátrixelemeket úgy indexeljük, hogy  $\alpha = 7, 8, 9$ , illetve  $l = 1, 2, \dots, 6$  értéket vehessen fel.

2. *Lemma*: A  $\hat{\Phi}_N$  sorfejtési együttható mátrixok mindazon eleme zérus, amelyeknek első indexe 7, 8 vagy 9, azaz

$$\hat{\Phi}_N^{\alpha_1, l_1, \dots, \alpha_n, \dots, l_m, \dots} = 0. \quad (3.44)$$

Ennek a lemmának a közvetlen következménye lesz például, hogy egyedül mágneses tér soha nem indít áramot a szilárdtestekben, bármilyen közelítésben is vizsgáljuk a problémát. Ez a tény a klasszikus elektrodinamikai szemléletből természetesen azonnal következik.

3. *Lemma*: A  $\hat{\Phi}_N$  sorfejtési együttható mátrixok elemei a  $\bar{k}$  változó páros, vagy páratlan függvényei aszerint, hogy az elemek jellemzésére szolgáló indexcsoporton belül  $l$ -típusú index páros, vagy páratlan számban fordul elő, azaz

$$\hat{\Phi}_N^{l_1, \alpha_1, \dots, l_m, \dots}(\bar{k}) = (-1)^m \hat{\Phi}_N^{l_1, \alpha_1, \dots, l_m, \dots}(-\bar{k}), \quad (3.45)$$

ahol  $m$  az indexcsoportban szereplő összes  $l$ -típusú indexek számát jelenti.

Ennek a lemmának lesz például a következménye, hogy az eloszlásfüggvénynek az elektromos tér négyzetét tartalmazó tagja az áramokhoz nem ad járulékot.

Összefoglalva eredményeinket megállapíthatjuk, hogy a Boltzmann-féle transzportegyenlet megoldását sikerült a perturbációk szerint haladó sor alakjában előállítani. A sorfejtési együtthatókat határozott integrálok szolgáltatják, amelyek a kristályt jellemző függvények ismeretében, valamint egy, a Boltzmann-egyenletnél lényegesen egyszerűbb szerkezetű integrálegyenlet megoldása után kiszámíthatók. Az integrálokban lényeges szerepet játszó Green-függvény és a sorfejtési együtthatók néhány általános tulajdonságát megismertük. A következő fejezetben az általános eredményeket lineáris közelítés esetében fogjuk alkalmazni és azt várjuk, hogy az irodalomból jól ismert eredményekhez hasonlókat kapunk.

#### 4. Lineáris közelítés

Ennek a fejezetnek a feladata, hogy az előbbieken talált általános megoldást lineáris közelítés esetében alkalmazzuk. A lineáris közelítés alatt kizárólag azt értjük, hogy az eloszlásfüggvény (3.19) alakú sorfejtéséből csupán az első tagot vesszük figyelembe. Tekintettel a 2. lemma eredményére ebben az esetben az eloszlásfüggvény a  $\bar{H}$  mágneses tértől független és az elektromos tér, valamint hőmérsékletgradiens komponenseitől lineárisan függ. A lineáris közelítés elnevezést tehát a perturbációkra vonatkoztatjuk és az nincs kapcsolatban valamilyen speciális hőmérsékleti tartománnyal, vagy esetleg a relaxációs idő létezésével. A lineáris köze-

lítésen belül, amely alkalmazása tehát kis perturbációk esetén jogos, lehet esetleg további közelítő módszereket alkalmazni, mint például magas hőmérsékleten érvényes tárgyalást, stb.

Jelen fejezet első felében megmutatjuk, hogy az irreverzibilis termodinamikából jól ismert Onsager-relációk a lineáris közelítés közvetlen eredményeként kaphatók, azokat külön nem kell az elméletbe beépíteni. A fejezet második felében a termoelektromos effektusokat tárgyaljuk és az ezekre jellemző együtthatókat fejezzük ki mikroszkopikus mennyiségekkel. Az említett effektusok természetesen régóta ismeretesek és a rájuk jellemző együtthatókat is sokszor, különböző közelítésekben kiszámolták. A mi eredményeink is hasonlóak lesznek, de a kristályra jellemző mennyiségekkel való kapcsolatot pontosabban írják le.

Mielőtt a lineáris közelítés tárgyalásához kezdenénk, felírjuk az áramokat, amelyek a kísérleti fizikust elsősorban érdeklik, hiszen az eloszlásfüggvény mérésére általában nem áll megfelelő módszer rendelkezésre. Valamilyen  $P$  mennyiség transzportját, azaz a  $P$  mennyiséghez rendelhető áramsűrűséget a következő integrállal lehet megadni:

$$\bar{j}_P = \frac{1}{4\pi^3} \int P f \bar{v} d^3 \bar{k}. \quad (4.1)$$

Speciálisan a részecske áramsűrűség

$$\bar{j} = \frac{1}{4\pi^3} \int f \bar{v} d^3 \bar{k}, \quad (4.2)$$

ami az „ $e$ ” elektromos töltéssel szorozva az elektromos áramsűrűséget adja. A hőáramsűrűség az elektronok Fermi-nívónál nagyobb energiájának a transzportja, azaz

$$\bar{w} = \bar{j}_{(E-\zeta)} = \frac{1}{4\pi^3} \int (E - \zeta) f \bar{v} d^3 \bar{k}. \quad (4.3)$$

A hőáramsűrűség fenti definíciója a termodinamika első főtételével van kapcsolatban, ugyanis

$$dE = d'Q + \mu dN \quad (4.4)$$

összefüggésének megfelelően az áramok

$$\bar{u} = \bar{w} + \mu \bar{j}, \quad (4.5)$$

ahol  $\bar{u}$  a teljes energia áramsűrűség és  $\mu$  a kémiai potenciál, ami az elektromos energia és Fermi-energia összege, azaz

$$\mu = eU + \zeta. \quad (4.6)$$

A (4.5) kifejezésből a hőáramsűrűséget kifejezve

$$\begin{aligned} \bar{w} = \bar{u} - \mu \bar{j} &= \frac{1}{4\pi^3} \int (E + eU) f \bar{v} d^3 \bar{k} - \\ &- \mu \frac{1}{4\pi^3} \int f \bar{v} d^3 \bar{k} = \frac{1}{4\pi^3} \int (E - \zeta) f \bar{v} d^3 \bar{k}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

ami megfelel a (4.3) definíciónak.



A további számítások miatt célszerű lesz a (4.2) és (4.3) áramsűrűségeket egy hatos áramsűrűségbe összefoglalni

$$\tilde{J} = [\tilde{J}, \tilde{w}] = \frac{1}{4\pi^3} \int f \tilde{V} d^3 \bar{k}, \quad (4.8)$$

ahol  $\tilde{V}$  a következő hatos sebességet jelöli:

$$\tilde{V} = [\bar{v}, (E - \zeta) \bar{v}]. \quad (4.9)$$

Ezt a hatos áramsűrűséget fogjuk meghatározni az előző fejezet általános eredményeit felhasználva, elsőrendű közelítésben.

A Boltzmann-egyenlet megoldása elsőrendű közelítésben (3.20) és (3.21) szerint

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial E} \hat{\phi}_1 \hat{F}, \quad (4.10)$$

ahol (3.32) alapján

$$\hat{\phi}_1 = \int \hat{A}_1(\bar{k}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (4.11)$$

Bevezetve a következő hatos erőt:

$$\tilde{F} = - \left[ \frac{\partial \mu}{\partial \bar{r}}, \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} \right], \quad (4.12)$$

a (4.10) kifejezés jobb oldalán a mátrixok szorzata így írható:

$$\hat{\phi}_1 \hat{F} = \frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f_0}{\partial E'} \tilde{V}' \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' \cdot \tilde{F}. \quad (4.13)$$

A (4.10) kifejezés jobb oldalán szereplő  $f_0$  függvény nem ad járulékot a (4.8) integrálhoz, mert  $f_0 \bar{k}$ -nak páros,  $\tilde{V}$  pedig páratlan függvénye. Így az áramsűrűség most már felírható, ha (4.13)-at (4.10)-be, majd az így kapott eredményt (4.8)-ba helyettesítjük

$$\tilde{J} = \frac{2T_0}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f_0'}{\partial E'} (\tilde{V} \circ \tilde{V}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' \cdot \tilde{F}, \quad (4.14)$$

ahol a diadikus szorzást hatos vektorokra is általánosítottuk és így természetesen a transzponáltra fennáll, hogy

$$(\tilde{V} \circ \tilde{V}')^+ = (\tilde{V}' \circ \tilde{V}). \quad (4.15)$$

A (4.14) összefüggést egyszerűbben írhatjuk, ha bevezetjük az

$$\tilde{\tilde{L}} = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f_0'}{\partial E'} (\tilde{V} \circ \tilde{V}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' \quad (4.16)$$

hatos tenzort. Ekkor

$$\tilde{J} = \tilde{\tilde{L}} \tilde{F}. \quad (4.17)$$

Ez az összefüggés az áramok és az erők közötti lineáris kapcsolatot írja le, amely az irreverzibilis termodinamika kiindulási egyenletének tekinthető és — mint látjuk — megalapozását a statisztikus mechanika szolgáltatja, ha csupán elsőrendű

közelítésben vizsgáljuk a jelenségeket. Míg az irreverzibilis termodinamika nem megy túl ezen a közelítésen és csak fenomenologikus leírást ad, addig a statisztikus mechanika keretein belül lehetőség van magasabb rendű tagok tárgyalására is és a vezetési együtthatók mikroszkopikus mennyiségekkel vannak kifejezve. Az irreverzibilis termodinamikában külön bebizonyítják, hogy a (4.16) tenzor szimmetrikus és ezt a tulajdonságot Onsager-reláció néven tartják számon. Esetünkben ez közvetlenül következik a (3.35) szimmetria tulajdonságból, ha (4.16)-ban az integrálási változókat felcseréljük és alkalmazzuk a (4.15) összefüggést

$$\tilde{\bar{L}}^+ = \tilde{\bar{L}}. \quad (4.18)$$

Vegyük észre, hogy a Green-függvény most felhasznált szimmetriatulajdonsága lényegében a (3.6) összefüggéssel kapcsolatban kihasznált mikroszkopikus reverzibilitás következménye, így az Onsager-relációk levezetése során mi is ezt az elvet használtuk ki — az irodalomhoz hasonlóan [20] —, de ezt már előzőleg beépítettük a Boltzmann-egyenletbe.

Térjünk most vissza a szokásos hármas formalizmusra, hogy egyenleteink áttekinthetőbbek legyenek. A (4.16) hatos tenzor helyett három darab hármas tenzort vezethetünk be:

$$\tilde{\bar{L}} = \begin{pmatrix} \bar{L}^{(1)} & \bar{L}^{(2)} \\ \bar{L}^{(2)+} & \bar{L}^{(3)} \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

ahol

$$\bar{L}^{(1)} = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (\bar{v} \circ \bar{v}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' = \bar{L}^{(1)+}, \quad (4.20)$$

$$\bar{L}^{(2)} = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (\bar{v} \circ \bar{v}') (E' - \zeta) \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}', \quad (4.21)$$

$$\bar{L}^{(2)+} = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (\bar{v} \circ \bar{v}') (E - \zeta) \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}', \quad (4.22)$$

$$\bar{L}^{(3)} = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (\bar{v} \circ \bar{v}') (E - \zeta) (E' - \zeta) \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' = \bar{L}^{(3)+}. \quad (4.23)$$

A részecske- és hőáramsűrűség

$$\bar{j} = -\bar{L}^{(1)} \frac{\partial \mu}{\partial \bar{r}} - \bar{L}^{(2)} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = \bar{L}^{(1)} \left( e\bar{E} - \frac{\partial \zeta}{\partial \bar{r}} \right) - \bar{L}^{(2)} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}}, \quad (4.24)$$

$$\bar{w} = -\bar{L}^{(2)+} \frac{\partial \mu}{\partial \bar{r}} - \bar{L}^{(3)} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = \bar{L}^{(2)+} \left( e\bar{E} - \frac{\partial \zeta}{\partial \bar{r}} \right) - \bar{L}^{(3)} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}}. \quad (4.25)$$

Most meg fogjuk vizsgálni a vezetési jelenségeket és termoelektromos effektusokat.

Az elektromos vezetőképesség tenzora homogén anyagban az elektromos áramsűrűség és elektromos térerősség között létesít kapcsolatot, ha a hőmérséklet-gradiens zérus, azaz

$$\frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = 0 \quad \text{és} \quad \frac{\partial \zeta}{\partial \bar{r}} = 0 \quad \text{esetén} \quad \bar{j}_e = e\bar{j} = \bar{\sigma}\bar{E}. \quad (4.26)$$



A (4.24) és (4.20) egyenletek alapján

$$\bar{\sigma} = e^2 \bar{L}^{(1)}; \quad \bar{\sigma}^+ = \bar{\sigma}, \quad (4.27)$$

tehát az elektromos vezetőképesség tenzora szimmetrikus.

A hővezetőképesség tenzora a hőáramsűrűség és a hőmérséklet negatív gradiense között létesít lineáris kapcsolatot, ha részecske áram nem folyik, azaz

$$\bar{j} = 0 \quad \text{esetén} \quad \bar{w} = -\bar{\kappa} \frac{\partial T}{\partial r}. \quad (4.28)$$

A (4.20)–(4.25) összefüggések alapján

$$\bar{\kappa} = \frac{1}{T} \{ \bar{L}^{(3)} - \bar{L}^{(2)+} (\bar{L}^{(1)})^{-1} \bar{L}^{(2)} \}; \quad \bar{\kappa}^+ = \bar{\kappa}, \quad (4.29)$$

tehát a hővezetőképesség tenzora is szimmetrikus.

A termoelektromos erő tenzora a kémiai potenciál és a hőmérséklet gradiensei között létesít kapcsolatot, ha részecske áram nem folyik, azaz

$$\bar{j} = 0 \quad \text{esetén} \quad -\frac{\partial \mu}{\partial r} = \bar{S} \frac{\partial T}{\partial r}. \quad (4.30)$$

A (4.24), (4.20) és (4.21) összefüggések alapján

$$\bar{S} = \frac{1}{T} (\bar{L}^{(1)})^{-1} \bar{L}^{(2)}. \quad (4.31)$$

Látható, hogy a termoelektromos erő tenzora általában nem szimmetrikus, így általános esetben nem lehet olyan főtengetőrendszert találni, hogy a hőmérsékletgradiens és az általa létesített kémiai potenciál gradiense egy irányba mutassanak, ha a hőmérsékletgradiens a főtengetők irányába esik. A gyakorlatban legtöbbször előforduló termofeszültséget (4.30) vonal menti integrálja adja.

A teljesség kedvéért fejezzük ki az  $\bar{L}$  tenzorokat és az áramsűrűségeket a most bevezetett vezetési együttható tenzorokkal:

$$\bar{L}^{(1)} = \frac{1}{e^2} \bar{\sigma}, \quad (4.32)$$

$$\bar{L}^{(2)} = \frac{T}{e^2} \bar{\sigma} \bar{S}, \quad \bar{L}^{(2)+} = \frac{T}{e^2} \bar{S}^+ \bar{\sigma}, \quad (4.33)$$

$$\bar{L}^{(3)} = T \bar{\kappa} + \left( \frac{T}{e} \right)^2 \bar{S}^+ \bar{\sigma} \bar{S}, \quad (4.34)$$

$$\bar{j}_e = -\frac{1}{e} \bar{\sigma} \left( \frac{\partial \mu}{\partial r} + \bar{S} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (4.35)$$

$$\bar{w} = T \bar{S}^+ \bar{j} - \bar{\kappa} \frac{\partial T}{\partial r}. \quad (4.36)$$

Az áramok értelmezése nyilvánvaló; az elektromos áramot a kémiai potenciálkülönbség és a termoelektromos erő hozza létre, a hőáram egy része a hővezetéssel, azaz a hőmérsékletkülönbséggel kapcsolatos, másik része a részecskékhez rendelhető  $\bar{S}^+$  „entrópia” szállítása a részecske áram útján.

A termoelektromos effektusok tárgyalása céljából — *Callen* nyomán [21] — vizsgáljunk egy idealizált kísérleti elrendezést. A szilárdtestben, amelyen a méréseket akarjuk végezni, a hőmérséklet eloszlást külső, végtelen hőkapacitásúnak feltételezett hőtartályok állítják be. A termoelektromos effektusok éppen abban jelentkeznek, hogy a szilárdtest ezektől a hőtartályoktól vesz fel, vagy ezeknek ad le hőt. A leadott hő  $-\text{div } \bar{u}$ , ahol  $\bar{u}$  az energia áramsűrűség. Feladatunk ennek a divergenciának a meghatározása. Írjuk ezt fel a (4.5) összefüggés alapján, de vegyük figyelembe, hogy

$$\text{div } \bar{j} = 0, \quad (4.37)$$

mert a részecskék nem halmozódhatnak fel a szilárdtest egy pontjában. Ekkor a kérdéses negatív divergencia

$$-\text{div } \bar{u} = -\text{div } \bar{w} - \bar{j} \frac{\partial \mu}{\partial r}. \quad (4.38)$$

Most tekintettel a (4.35) és (4.36) kifejezésekre

$$-\text{div } \bar{u} = \bar{\sigma}^{-1} \bar{j}_e^2 - \text{div} \left( -\bar{\kappa} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - T \text{div} (\bar{S}^+ + \bar{j}). \quad (4.39)$$

Az első tag a szilárdtest által leadott Joule-hő, a másodikat a szilárdtest veszi fel a hőtartálytól és a tiszta hőáram forrassűrűsége, a harmadik tag a Thomson-hőről fog számot adni.

Thomson-effektus alatt a következőt értjük; ha elektromos áram folyik hőmérsékletgradiens jelenlétében, akkor hőleadás, vagy hőfelvétel következik be, mert a részecskék „entrópiája” hőmérsékletfüggő és az áram által történő szállításuk közben különböző hőmérsékletű helyekre kerülnek. Ezt a hőmennyiséget nevezik Thomson-hőnek. Defináljuk a  $\bar{\tau}$  Thomson-együttható tenzort a következő összefüggéssel:

$$(-\text{div } \bar{u})_{Th} = (\bar{\tau} \bar{j}_e) \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (4.40)$$

ahol bal oldalon a Thomson-hő áll, ami megegyezik a (4.39) egyenlet jobb oldali harmadik tagjával. Ezeket összehasonlítva homogén anyagban

$$\bar{\tau} = -\frac{T}{e} \frac{\partial \bar{S}^+}{\partial T}. \quad (4.41)$$

A negatív előjel azt jelenti, hogy ha az elektromos áram és a hőmérsékletgradiens egyirányú, akkor a szilárdtest vesz fel hőt a hőtartálytól. Szokásos  $\bar{\tau}$ -t „elektromos fajhőnek” is nevezni olyan értelemben, ahogy  $\bar{S}^+$  a részecske „entrópia”, illetve  $\bar{S}^+/e$  az „elektromos entrópia”.

Két újabb termoelektromos effektust várhatunk, ha két anyag érintkezési felülete mentén vizsgáljuk a viszonyokat. Egyrészt, ha hőmérsékletgradiens nincs,



de elektromos áram folyik, akkor a hőáramnak ugrása van, ami Peltier-effektus néven ismeretes. A  $\bar{\pi}_{AB}$  Peltier-tenzort a

$$\bar{w}_A - \bar{w}_B = \bar{\pi}_{BA} \bar{j}_e, \quad \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = 0 \quad (4.42)$$

összefüggés definiálja, ahol az indexek az  $A$  és  $B$  anyagra utalnak, az áramok  $A$ -ból  $B$ -be folynak. Ezt az egyenletet a (4.36) összefüggéssel összehasonlítva tekintettel (4.37)-re

$$\bar{\pi}_{AB} = \frac{T}{e} (\bar{S}_B^+ - \bar{S}_A^+). \quad (4.43)$$

A Peltier-hő a hőáram ugrásából adódik és (4.42) infinitézimális térfogati integráljából, vagy a (4.39) egyenlet jobb oldali harmadik tagjából számítható. Másrészt, ha elektromos áram nem folyik, de hőmérsékletgradiens van, akkor a kémiai potenciál deriváltjának van ugrása, amit Seebeck-effektusnak neveznek. Az  $\bar{\epsilon}_{AB}$  Seebeck-tenzort a következő összefüggés definiálja:

$$\frac{1}{e} \left\{ \left( \frac{\partial \mu}{\partial \bar{r}} \right)_A - \left( \frac{\partial \mu}{\partial \bar{r}} \right)_B \right\} = \bar{\epsilon}_{AB} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}}, \quad \bar{j} = 0, \quad (4.44)$$

amit a (4.35) egyenlettel összehasonlítva

$$\bar{\epsilon}_{AB} = \frac{1}{e} (\bar{S}_B - \bar{S}_A). \quad (4.45)$$

Ez az effektus a termoelektromos erőnek felel meg különböző anyagok jelenléte esetén.

Az ismertetett termoelektromos effektusok általában együttesen fordulnak elő és gondos kísérleti elrendezést igényel, ha egymástól elkülönítve kívánjuk azokat vizsgálni. A teljesség kedvéért feljegyezzük még a Kelvin-relációkat tenzori formában:

$$\bar{\pi}_{AB} = T \bar{\epsilon}_{AB}^+, \quad (4.46)$$

$$\bar{\tau}_A - \bar{\tau}_B = T \frac{\partial \bar{\epsilon}_{AB}^+}{\partial T}. \quad (4.47)$$

A Boltzmann-egyenlet elsőrendű közelítésben történt megoldása módot adott arra, hogy a vezetési jelenségeket és termoelektromos effektusokat tárgyaljuk. A közelítés, amit eddig alkalmaztunk, annyi volt, hogy a perturbációkból az elektromos teret és hőmérsékletgradienst vettük figyelembe lineárisan. Most szeretnénk megmutatni, hogy ezen belül más, további közelítést is lehet alkalmazni, így pl. nem túl magas hőmérsékleten érvényes a Bethe–Sommerfeld sorfejtés [5], amely szerint, ha  $g(E)$  akárhányszor differenciálható függvény és  $g(0)=0$ , akkor

$$-\int_0^\infty g(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} dE = 2 \sum_{n=0}^\infty c_{2n} T_0^{2n} \left( \frac{d^{2n} g}{dE^{2n}} \right)_{E=\zeta};$$

$$c_0 = \frac{1}{2}, \quad c_{2n} = \sum_{l=1}^\infty \frac{(-1)^{l+1}}{l^{2n}} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.48)$$

Pl.:

$$c_2 = \frac{\pi^2}{12}, \quad c_4 = \frac{7\pi^4}{720}, \quad \text{stb.}$$

Ha most  $g(E)$  speciális szorzat alakú, akkor a Leibnitz-szabály alkalmazásával kaphatjuk a következő hasznos összefüggést:

$$-\int_0^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial E} (E - \zeta)^m G(E) dE = 2 \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n} T_0^{2n} \prod_{l=1}^m (2n+1-l) \left( \frac{\partial^{2n-m} G}{\partial E^{2n-m}} \right)_{E=\zeta}. \quad (4.49)$$

Ennek segítségével az  $\bar{L}$  tenzorokat majd egyszerűbb alakban írhatjuk nem túl magas hőmérséklet esetén. Előbb azonban a (4.20)–(4.23) integrálokba vezessünk be polárkoordinátákat:

$$d^3 \bar{k} = \left| \frac{\partial E}{\partial \bar{k}} \right|^{-1} dS dE = \frac{dS dE}{\hbar |\bar{v}|}, \quad (4.50)$$

ahol  $dS$  a felületelemet jelenti a  $\bar{k}$ -térben és felhasználtuk (3.3)-t is. Vezessük be még a következő jelölést

$$\bar{\sigma}(E, E') = -\frac{2T_0 e^2}{V \hbar^2} \iint \frac{\bar{v} \circ \bar{v}'}{|\bar{v}| |\bar{v}'|} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') dS dS' \quad (4.51)$$

és ekkor a (4.20)–(4.23) integrálok így írhatók:

$$\bar{L}^{(1)} = -\frac{1}{e^2} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \bar{\sigma}(E, E') dE dE', \quad (4.52)$$

$$\bar{L}^{(2)} = -\frac{1}{e^2} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (E' - \zeta) \bar{\sigma}(E, E') dE dE', \quad (4.53)$$

$$\bar{L}^{(3)} = -\frac{1}{e^2} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (E - \zeta)(E' - \zeta) \bar{\sigma}(E, E') dE dE'. \quad (4.54)$$

Ha most alkalmazzuk a (4.49) sorfejtést és csak az első el nem tűnő tagokat tartjuk meg, akkor

$$\bar{L}^{(1)} \cong \frac{1}{e^2} \bar{\sigma}(\zeta, \zeta), \quad (4.55)$$

$$\bar{L}^{(2)} \cong \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{kT}{e} \right)^2 \left( \frac{\partial \bar{\sigma}(\zeta, E')}{\partial E'} \right)_{E'=\zeta}, \quad (4.56)$$

$$\bar{L}^{(3)} \cong \frac{\pi^4}{9} \left( \frac{kT}{e} \right)^4 \left( \frac{\partial^2 \bar{\sigma}(E, E')}{\partial E \partial E'} \right)_{E, E'=\zeta}. \quad (4.57)$$



Ezek segítségével a (4.27), (4.29) és (4.31) vezetési együttható tenzorok

$$\bar{\sigma} \cong \bar{\sigma}(\zeta, \zeta), \quad (4.58)$$

$$\bar{\kappa} \cong \frac{\pi^4}{0} \frac{1}{T} \left( \frac{kT}{\sqrt{e}} \right)^4 \left\{ \frac{\partial^2 \bar{\sigma}(E, E')}{\partial E \partial E'} - \frac{\partial \bar{\sigma}(E, \zeta)}{\partial E} \bar{\sigma}^{-1} \frac{\partial \bar{\sigma}(\zeta, E')}{\partial E'} \right\}_{E, E' = \zeta}, \quad (4.59)$$

$$\bar{S} \cong \frac{\pi^2 k^2}{3} T \left\{ \bar{\sigma}^{-1} \frac{\partial \bar{\sigma}(\zeta, E')}{\partial E'} \right\}_{E' = \zeta}. \quad (4.60)$$

A további termoelektromos effektusokra jellemző mennyiségek az utolsó egyenlet (4.41)-be, (4.43)-ba és (4.45)-be történő helyettesítésével már, meghatározhatók az alkalmazott közelítésben.

A teljesség kedvéért vezessük még be a Lorenz-számhoz rendelhető tenzort megjegyezve, hogy ennek mint tenzormennyiségnek csak akkor van értelme, ha  $\bar{\sigma}$ - és  $\bar{\kappa}$ -ra nézve főtenzelyrendszerben dolgozunk, ekkor ugyanis a Lorenz-szám tenzor is diagonális és elemei a főtenzelyek irányában mérhető Lorenz-számok. Nem túl magas hőmérsékleten, azaz az elektron mint Fermi-részecske elfajulási hőmérsékleténél alacsonyabb hőmérsékleteken ezt írhatjuk

$$\bar{L} = \frac{1}{T} \bar{\sigma}^{-1} \bar{\kappa} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k}{e} \right)^2 \left\{ \frac{\pi^2}{3} (kT)^2 \bar{\sigma}^{-1} \left[ \frac{\partial^2 \bar{\sigma}}{\partial E \partial E'} - \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial E} \bar{\sigma}^{-1} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial E'} \right] \right\}_{E, E' = \zeta}, \quad (4.61)$$

ahol  $\bar{L}$  a Lorenz-szám tenzor.

A következő fejezetben túlmegyünk az elsőrendű közelítésen és míg az elektromos tér és hőmérsékletgradiens szerepét továbbra is lineárisan vesszük figyelembe, a mágneses tér is meg fog jelenni egyenleteinkben.

### 5. Mágneses tér hatása

A 3. fejezetben előállítottuk a Boltzmann-egyenlet megoldását sorfejtés alakjában, a sorfejtési együtthatókat a (3.32) egyenlet adta. Míg az előző fejezetben a sorfejtésből csak a perturbációban elsőrendű tagokat tartottuk meg, most továbblépünk a közelítésben és mindazokat a tagokat figyelembe fogjuk venni, amelyek az elektromos térerősségtől, vagy a hőmérsékletgradienstől lineárisan függenek tekintet nélkül arra, hogy ezek a tagok a mágneses teret milyen rendben tartalmazzák. Az így nyert közelítésből zérus mágneses tér esetén a már tárgyalt lineáris eredmények adódnak; ha a mágneses teret is csak elsőrendben vesszük figyelembe, akkor a jól ismert galvanomágneses, termomágneses és galvano-termomágneses effektusokat tudjuk tárgyalni, amint azt e fejezet végén meg is tesszük. Mágneses térben másodrendben a mágneses ellenváltozásokat szokás vizsgálni, de lehet további, magasabb rendű tagokat is számítani. Az előző fejezethez hasonlóan elméletünkötől nem várjuk új effektusok megjövedölését, csupán az effektusokra jellemző vezetési együtthatók és a kristályra jellemző mikroszkopikus mennyiségek közötti kapcsolat leírását.

A transzportegyenlet megoldása (3.10) szerint

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi \quad (5.1)$$

alakú, ahol  $\bar{E}$  és  $\partial T / \partial \bar{r}$  szerint lineáris, de  $\bar{H}$ -ban tetszés szerinti közelítésben

$$\Phi = \sum_{N=1}^{\infty} \hat{\Phi}_N \hat{F}^N = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{m=1}^6 \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}=7}^9 \hat{\Phi}_N^{m, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}} \hat{F}_{\alpha_{N-1}} \dots \hat{F}_{\alpha_1} \hat{F}_m. \quad (5.2)$$

Az egyszerűbb írás kedvéért vezessünk be egy  $\tilde{\Phi}_N$  hatosvektort, amelynek komponensei definíciószerűen

$$\tilde{\Phi}_N^m = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}=7}^9 \hat{\Phi}_N^{m, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}} \hat{F}_{\alpha_{N-1}} \dots \hat{F}_{\alpha_1}, \quad \tilde{\Phi}_1^m = \hat{\Phi}_1^m. \quad (5.3)$$

Ennek segítségével (5.2) így írható

$$\Phi = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{m=1}^6 \tilde{\Phi}_N^m \hat{F}_m. \quad (5.4)$$

A további számítások céljából fel kell írunk az (5.2), ill. (5.3) kifejezésekben szereplő sorfejtési együttható mátrixok elemeit. A 2. lemmát kifejező (3.44) összefüggés szerint a (3.32) integrálon belül a szumma nem ad járulékot, így

$$\hat{\Phi}_N^{m, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}} = \int \hat{A}_N^{m, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}}(\bar{k}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (5.5)$$

Ezeket az együtthatókat most már lépésenként kell előállítani, hiszen az  $\hat{A}_N$  mátrix elemei tartalmazzák az  $(N-1)$ -ed rendű együtthatókat.  $\hat{A}_1$  természetesen ismert, hiszen  $\hat{\varphi}_0 = f_0$  és ezért írhatjuk, hogy

$$\hat{\Phi}_1^m = \int \hat{A}_1^m(\bar{k}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (5.6)$$

A másodrendű együtthatók tekintettel (3.24)-re

$$\hat{\Phi}_2^{m, \alpha} = - \frac{8\pi^3 T_0}{V \hbar^2 c} \int \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \bar{\omega}_{\alpha-6}'' \left[ \frac{\partial f_0}{\partial E''} \hat{\Phi}_1^m(\bar{k}'') \right] d^3 \bar{k}''. \quad (5.7)$$

Vegyük figyelembe a tetszés szerinti  $g(\bar{k})$  differenciálható függvényre vonatkozó

$$\bar{\omega} \left[ \frac{\partial f_0}{\partial E} g(\bar{k}) \right] = \frac{\partial f_0}{\partial E} \bar{\omega} g(\bar{k}) \quad (5.8)$$

összefüggést, ami  $\bar{\omega}$  (3.26) alatti definíciójából és a (3.3) egyenletből közvetlenül következik, valamint írjuk be (5.6)-t is az (5.7) egyenlőségbe, akkor

$$\hat{\Phi}_2^{m, \alpha} = - \frac{8\pi^3 T_0}{V \hbar^2 c} \iint \hat{A}_1^m(\bar{k}') \frac{\partial f_0}{\partial E''} \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \bar{\omega}_{\alpha-6}'' \gamma(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}''. \quad (5.9)$$



Most vezessük be az  $\bar{\Omega}$  operátort a

$$\bar{\Omega}g(\bar{k}, \bar{k}') = -\frac{8\pi^3 T_0}{V\hbar^2 c} \int \frac{\partial f_0''}{\partial E''} \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \bar{\omega}'' g(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' \quad (5.10)$$

definiáló egyenlettel, amely az operátor hatását írja le egy teszőleges  $g(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényre.

Közbevetőleg meg kell jegyeznünk, hogy az  $\bar{\Omega}$  operátor a szimmetria tulajdonságokat általában nem hagyja változatlanul, amire bizonyos számítások során gondosan ügyelni kell. Így pl. (3.35) alapján  ${}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}') = {}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k})$ , de ugyanakkor

$$\bar{\Omega}{}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}') = -\bar{\Omega}{}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k}), \quad (5.11)$$

ami közvetlenül következik a parciális integrálással belátható

$$\int g_1(\bar{k}) \bar{\omega} g_2(\bar{k}) d^3 \bar{k} = -\int g_2(\bar{k}) \bar{\omega} g_1(\bar{k}) d^3 \bar{k} \quad (5.12)$$

összefüggésből, ahol  $g_1$  és  $g_2$  tetszés szerinti függvények.

Visszatérve az (5.9) összefüggésre, az újonnan definiált operátor segítségével az így írható

$$\hat{\Phi}_2^{m,\alpha} = \int \hat{A}_1^m(\bar{k}') \bar{\Omega}_{\alpha-6} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (5.13)$$

Lépésről lépésre haladva az (5.5) együtthatót a következő integrál állítja elő:

$$\hat{\Phi}_N^{m,\alpha_1,\dots,\alpha_{N-1}} = \int \hat{A}_1^m(\bar{k}') \bar{\Omega}_{\alpha_1-6} \dots \bar{\Omega}_{\alpha_{N-1}-6} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (5.14)$$

Vezessünk be most új jelölést az  $\bar{\Omega}$  operátor és a  $\bar{H}_0$  mágneses tér skalárszorzata egymásután történő alkalmazására:

$$(\bar{H}_0 \bar{\Omega})^{N-1} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') = G_N(\bar{k}, \bar{k}') \quad (5.15)$$

és ekkor az (5.3) hatosvektor komponensei így írhatók:

$$\tilde{\Phi}_N^m = \int \hat{A}_1^m(\bar{k}') G_N(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (5.16)$$

Vagy elvégezve az (5.4) alatt kijelölt összegezéseket és bevezetve a

$$\sum_{N=1}^{\infty} G_N(\bar{k}, \bar{k}') = G(\bar{k}, \bar{k}') \quad (5.17)$$

jelölést, valamint a (4.9) és (4.12) alatti hatosvektorokat, az (5.4) összefüggést a következő alakban írhatjuk:

$$\Phi = \frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' G(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' \cdot \tilde{F}. \quad (5.18)$$

Érdemes ezt a kifejezést összehasonlítani a lineáris közelítés esetén érvényes (4.13) összefüggéssel. Látható, hogy a különbség csupán annyi, hogy az ottani  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  helyett most a mágneses teret is tartalmazó  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  függvény szerepel.

Ennek az új függvénynek a meghatározásához a kristályról újabb információkra természetesen nincs szükségünk; ha ismerjük a  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényt, akkor integrálással és összegezéssel  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  már meghatározható. Az E. függelékben bebizonyítjuk a következő nevezetes lemmát:

4. *Lemma:* A  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényben most explicite is jelölve a  $H$  mágnesestér függést, érvényes a következő szimmetria tulajdonság:

$$G(\bar{k}, \bar{k}') = G(-\bar{k}, -\bar{k}')$$

és

$${}_0G(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') = {}_0G(-\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}'). \quad (5.19)$$

A lemma hasznosnak fog bizonyulni a jelen közelítésben érvényes Onsager-relációk bizonyítása során.

Az eloszlásfüggvény meghatározása után most már írjuk fel az áramokat. A lineáris közelítésben talált összefüggéseket minden további nélkül alkalmazhatjuk, ha azokban  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  helyett mindenhol  $G(\bar{k}, \bar{k}')$ -t írunk. Így tehát (4.17) és (4.16) összefüggésekhez hasonlóan

$$\tilde{J} = \tilde{L}(\bar{H}) \tilde{F}, \quad (5.20)$$

$$\tilde{L}(\bar{H}) = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (\tilde{V} \circ \tilde{V}') G(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}'. \quad (5.21)$$

Az integrálási változókat felcserélve és a 4. lemmát, azaz az (5.19) összefüggést kihasználva közvetlenül adódnak a mágneses tér jelenlétében érvényes Onsager-relációk

$$\tilde{L}^+(\bar{H}) = \tilde{L}(-\bar{H}). \quad (5.22)$$

Hasonlóan a lineáris közelítéshez, (5.20) az irreverzibilis termodinamika alapfeltevései között szerepel, az (5.22) relációkat a mikroszkopikus reverzibilitás elve alapján szokták igazolni és végül a vezetési együtthatókat kifejező (5.21) integrálok a statisztikus mechanika eredményei, amelyek már túlmennek az irreverzibilis termodinamika keretein. Felmerül a kérdés, hogyan alkalmazható egyáltalán ezekre a jelenségekre az irreverzibilis termodinamika, hiszen itt már magasabb rendű közelítéssel állunk szemben. A 2. lemma következményeként a (3.19) sorfejtésben olyan tagok nem szerepelnek, amelyek kizárólag a mágneses teret tartalmaznák, így pusztán mágneses erők áramot nem indítanak. Ebből következően az irreverzibilis termodinamika szempontjából erőnek csak az elektromos teret és a hőmérsékletgradienst kell tekinteni, a mágneses tér hatása pedig — (5.20)-nak megfelelően — az együtthatókba beolvasztható.

A gyakorlati számítások céljára célszerű az  $\tilde{L}(\bar{H})$  vezetési együtthatók (5.21) alatt felírt kifejezését a mágneses tér szerint sorbafejtett formában felírni. Az (5.17) és (5.15) összefüggések figyelembevételével

$$\tilde{L}(\bar{H}) = \frac{2kT}{V} \iint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (\tilde{V} \circ \tilde{V}') \sum_{N=0}^{\infty} (\bar{H}_0 \bar{\Omega})^N \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}', \quad (5.23)$$



vagy ha definiáljuk a következő együtthatókat

$$\begin{aligned}\hat{C}_{i,j_1,\dots,j_N,l} &= \frac{2kT}{V} \left( -\frac{8\pi^3 ekT}{V\hbar^2 c} \right)^N \iint \dots \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \\ &\dots \frac{\partial f_0^{(N)}}{\partial E^{(N)}} \tilde{V}_i \tilde{V}_l' \gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(1)}) \bar{\omega}_{j_N}^{(1)} \gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k}^{(2)}) \dots \\ &\dots \bar{\omega}_{j_1}^{(N)} \gamma(\bar{k}^{(N)}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N)},\end{aligned}\quad (5.24)$$

akkor a hatosáram  $i$ -ik komponense így írható

$$\tilde{J}_i = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{j_1,\dots,j_N}^3 \sum_{l=1}^6 \hat{C}_{i,j_1,\dots,j_N,l} \tilde{F}_l \bar{H}_{j_N} \dots \bar{H}_{j_1}. \quad (5.25)$$

Az F. függelékben bebizonyítjuk, hogy az (5.24) integrállal definiált együtthatók a következő szimmetria tulajdonsággal rendelkeznek:

$$\hat{C}_{i,j_1,\dots,j_N,l} = (-1)^N \hat{C}_{l,j_N,\dots,j_1,i}. \quad (5.26)$$

Ebből közvetlenül következik, hogy páratlan  $N$  esetén

$$\hat{C}_{i,j,k,\dots,m,\dots,k,j,i} = 0. \quad (5.27)$$

Ezek az eredmények a Jones [13] közleményében található, ide vonatkozó összefüggések általánosításainak tekinthetők, ugyanis ott csak  $N=1$  és  $N=2$  esetre vannak a  $\hat{C}$  együtthatók meghatározva, sőt ezekben az esetekben is csak bizonyos közelítésben érvényesek. Írjuk fel mi is az együtthatók konkrét alakját ezekre az esetekre. Előbb azonban általánosítsuk a diadikus szorzást több tényező esetére is, és pedig akkor a diadikus szorzat jelentsen egy mátrixot, amelynek elemei

$$(A \circ B \circ \dots \circ D)_{i,j,\dots,l} = A_i B_j \dots D_l, \quad (5.28)$$

ahol az indexek attól függően futnak 1–6, illetve 1–3 értékek között, hogy az illető tényező hatos-, vagy hármasektor. Ezzel az (5.25) és (5.24) kifejezések is egyszerűbb alakban írhatók:

$$\begin{aligned}\tilde{J} &= \sum_{N=0}^{\infty} \hat{C}_{N+2} \tilde{F} \bar{H}^N, \\ \hat{C}_{N+2} &= \frac{2kT}{V} \left( \frac{8\pi^3 ekT}{V\hbar^2 c} \right)^N \iint \dots \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \\ &\dots \frac{\partial f_0^{(N)}}{\partial E^{(N)}} \gamma(\bar{k}^{(N)}, \bar{k}') \{ \tilde{V} \circ \bar{\omega}^{(N)} \gamma(\bar{k}^{(N-1)}, \bar{k}^{(N)}) \circ \dots \\ &\dots \circ \bar{\omega}^{(1)} \gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(1)}) \circ \tilde{V}' \} d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N)},\end{aligned}\quad (5.30)$$

amely utóbbit az (5.24) összefüggésből úgy kaptuk, hogy az (5.12) és (5.8) átalakításokat  $N$ -szer egymásután alkalmaztuk.  $N=0$  esetben természetesen a mágneses

tértől független, elsőrendű közelítés eredményeit kapjuk vissza, hiszen megállapodva a  $\bar{k}^{(0)} \equiv \bar{k}$  jelölésben és a (4.16) összefüggéssel összehasonlítva

$$\hat{C}_2 = \tilde{L}. \quad (5.31)$$

$N=1$  esetén a mágneses teret is lineárisan tartalmazó tag együtthatóját kapjuk

$$\hat{C}_3 = \hat{A} = \frac{16\pi^3 ek^2 T^2}{V^2 \hbar^2 c} \iiint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \frac{\partial f''_0}{\partial E''} \gamma(\bar{k}'', \bar{k}') \{ \tilde{V} \circ \bar{\omega}'' \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \circ \tilde{V}' \} d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}'', \quad (5.32)$$

amelyet — mint a következő fejezetben látni fogjuk — *Jones* megfelelő összefüggésével teljesen hasonló alakúra lehet hozni.  $N=2$  esetén a mágneses teret kvadratikusan tartalmazó tag együtthatóját kapjuk

$$\hat{C}_4 = \hat{B} = \frac{128\pi^6 e^2 k^3 T^3}{V^3 \hbar^4 c^2} \iiint \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \frac{\partial f''_0}{\partial E''} \frac{\partial f'''_0}{\partial E'''} \gamma(\bar{k}''', \bar{k}') \{ \tilde{V} \circ \bar{\omega}''' \gamma(\bar{k}'', \bar{k}''') \circ \bar{\omega}'' \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \circ \tilde{V}' \} d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}'' d^3 \bar{k}'''. \quad (5.33)$$

amelyet — mint látni fogjuk — már nem lehet *Jones* megfelelő összefüggésével hasonló alakúra hozni csak abban az esetben, ha skalár relaxációs idő létezik, aminek feltételét a következő fejezetben adjuk meg. Meg kell itt jegyeznünk, hogy *Jones* levezetései nem hibásak, mert ő kezdettől fogva skalár relaxációs idő közelítés keretein belül dolgozott. Az (5.26) és (5.27)-ből következő szimmetria tulajdonságok természetesen általánosan érvényesek, azaz

$$\hat{A}_{ijk} = -\hat{A}_{kji}, \quad \hat{A}_{iji} = 0; \quad \begin{matrix} i, k = 1, \dots, 6, \\ j = 1, 2, 3, \end{matrix} \quad (5.34)$$

$$\hat{B}_{ijkl} = \hat{B}_{klji}; \quad \begin{matrix} i, k = 1, \dots, 6, \\ j, l = 1, 2, 3. \end{matrix} \quad (5.35)$$

Foglalkozunk most a galvanomágneses, termomágneses és galvano-termomágneses effektusokkal és próbáljuk ezeknek egységes tárgyalását adni. Ehhez a mágneses térben is elsőrendű közelítés eredményeit fogjuk felhasználni. A hatos áram ebben az esetben

$$\tilde{J} = \tilde{L}\tilde{F} + \hat{A}\tilde{F}\bar{H}. \quad (5.36)$$

Hasonló módon, mint a termoelektromos effektusok tárgyalása előtt tettük, próbáljunk valamilyen idealizált kísérleti elképzelést szem előtt tartani. Kezdetben valami  $\tilde{F}_0$  erő indítson  $\tilde{J}_0$  áramot, azaz

$$\tilde{J}_0 = \tilde{L}\tilde{F}_0. \quad (5.37)$$

Most kapcsoljuk be a  $\bar{H}$  mágneses teret, amely  $\tilde{J}_1$  áramot,

$$\tilde{J}_1 = \hat{A}\tilde{F}_0\bar{H}, \quad (5.38)$$

indít, ha a határfeltételek azt megengedik. Az (5.34) szimmetria tulajdonságok



alapján könnyen belátható, hogy a  $\tilde{J}_1$  áram az  $\tilde{F}_0$  erőre „merőleges”, azaz a hatos-vektorokra értelmezett skalárszorzatuk eltűnik, ugyanis

$$\begin{aligned}\tilde{F}_0 \tilde{J}_1 &= \tilde{F}_0 \hat{A} \tilde{F}_0 \bar{H} = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^6 \tilde{F}_{0i} \hat{A}_{ijk} \tilde{F}_{0k} \bar{H}_j = \\ &= \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^6 \frac{1}{2} (\hat{A}_{ijk} + \hat{A}_{kji}) \tilde{F}_{0i} \tilde{F}_{0k} \bar{H}_j = 0.\end{aligned}\quad (5.39)$$

Ha az  $\tilde{F}_0$  erőben összefoglalt elektromos tér és hőmérsékletgradiens a kristály valamelyik főtengelyének irányába mutat, akkor a  $\tilde{J}_1$  áram a primér  $\tilde{J}_0$  áramra is merőleges. (Zárójelben jegyezzük meg, hogy köbös szimmetriájú kristály esetén — lásd pl. Jones (13) ide vonatkozó megfontolásait, ami természetesen esetünkben is érvényes — az (5.34) szimmetria tulajdonságok mellett továbbiak is érvényesek, amelyek következtében a  $\tilde{J}_1$  áram a  $\bar{H}$  mágneses térre is merőleges lesz.)

A kérdéses effektusok most már a  $\tilde{J}_1$  áram felléptében nyilvánulnak meg, de jellemzésükre — a gyakorlati méréstechnikának megfelelően — azt a hatos erőt lehet megadni, amely hatására a  $\tilde{J}_1$ -t kompenzáló áram indul, azaz

$$\tilde{L} \tilde{F}_1 = -\tilde{J}_1 = -\hat{A} \tilde{F}_0 \bar{H}. \quad (5.40)$$

Az így definiált  $\tilde{F}_1$  erő könnyen meghatározható:

$$\tilde{F}_1 = -\tilde{L}^{-1} \hat{A} \tilde{L}^{-1} \tilde{J}_0 \bar{H} = \hat{R} \tilde{J}_0 \bar{H}, \quad (5.41)$$

ahol felhasználtuk (5.37)-t és bevezettük az

$$\hat{R} = -\tilde{L}^{-1} \hat{A} \tilde{L}^{-1}; \quad \hat{R}_{ijk} = -\sum_{m,n=1}^6 (\tilde{L}^{-1})_{im} \hat{A}_{mjn} (\tilde{L}^{-1})_{nk} \quad (5.42)$$

tenzort, amelyet a hármas írásmód kedvéért a következőképpen bonthatunk fel:

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} R_1 & \hat{R}_2 \\ -\hat{R}_2^+ & \hat{R}_3 \end{pmatrix}, \quad \text{pl.: } (\hat{R}_2)_{ijk} = \hat{R}_{ijk} \quad \text{ha} \quad \begin{matrix} i=1, 2, 3, \\ j=1, 2, 3, \\ k=4, 5, 6. \end{matrix} \quad (5.43)$$

ahol a transzportált mátrix elemeit úgy kapjuk, hogy az eredeti mátrix első és harmadik, azaz utolsó indexét felcseréljük. Ezzel a megjegyzéssel az (5.34) összefüggés és az abból következő szimmetria tulajdonságok így írhatók:

$$\hat{A}^+ = -\hat{A}, \quad (5.44)$$

$$\hat{R}^+ = -\hat{R}, \quad (5.45)$$

$$\hat{R}_1^+ = -\hat{R}_1, \quad \hat{R}_3^+ = -\hat{R}_3. \quad (5.46)$$

Meg kell még jegyeznünk, hogy a kompenzáló feszültségek, vagy azok egy része a határfeltételektől függően tranziens áramok útján is létrejöhetnek, így például

a mágneses tér bekapcsolása után keletkezett elektromos áram zárt áramkör hiányában tértöltést eredményez, amint az a Hall-effektus mérése esetén közismert.

Az (5.43) alatti tenzorok bevezetésével írjuk fel (5.41) alapján a kompenzáló erőket, hármass írásmódot alkalmazva. Ekkor

$$-\left(\frac{\partial\mu}{\partial\vec{r}}\right)_1 = \hat{R}_1 \bar{j}_0 \vec{H} + \hat{R}_2 \bar{w}_0 \vec{H}, \quad (5.47)$$

$$-\frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial\vec{r}}\right)_1 = -\hat{R}_2^+ \bar{j}_0 \vec{H} + \hat{R}_3 \bar{w}_0 \vec{H}. \quad (5.48)$$

A különböző mágneses effektusok általános esetben együttesen fordulnak elő és ha azokat külön-külön akarjuk tanulmányozni, gondos kísérleti elrendezésre, megfelelő határfeltételek beállítására van szükség. Attól függően, hogy kezdetben milyen áram folyik, majd a mágneses tér bekapcsolása után a járulékos áramot milyen erővel akarjuk kompenzálni, különböző mágneses effektusokról beszélünk, amelyekre még jellemző az is, hogy a határfeltételek milyenek. A kézenfekvő lehetőségeket a következő táblázat szemlélteti:

Primér áram	Kompenzáló erő	Határfeltétel	Jellemző tenzor	Szokásos elnevezés	Milyen effektus
$\bar{j}_0$	$(\partial\mu/\partial\vec{r})_1$	$\bar{w}=0$	$\hat{R}_1$	adiabatikus Hall	galvano-mágneses
$\bar{j}_0$	$(\partial T/\partial\vec{r})_1$	$\bar{w}=0$	$\hat{R}_2^+$	Ettingshausen	galvano-thermo-mágneses
$\bar{w}_0$	$(\partial\mu/\partial\vec{r})_1$	$\bar{j}=0$	$\hat{R}_2$	Ettingshausen—Nernst	
$\bar{w}_0$	$(\partial T/\partial\vec{r})_1$	$\bar{j}=0$	$\hat{R}_3$	Righi—Leduc	thermo-mágneses

Kézenfekvő lehetőségeket említettünk, mert a kísérleti fizikus elektromos- és hőszigetelő határfeltételeket tud kényelmesen megvalósítani. A primér áramok, kompenzáló erők és határfeltételekre adódó lehetőségeket kombinálva igen nagy számú effektust lehet produkálni, amint azt az irodalomban [5, 20, 21, 22, 23] sokszor meg is teszik, de az ezekre jellemző együtthatók az  $\hat{R}_1$ ,  $\hat{R}_2$  és  $\hat{R}_3$  mátrix elemeinek ismeretében kiszámíthatók.

A lehetőségek száma tovább növekszik, ha a határfeltételeket különböző anizotrópia effektusokkal kombináljuk, de ilyenek már mágneses tér nélküli esetben is felléphetnek. Így például, ha egy kristályra, nem főténgelyrendszerével egybeeső koordináta-rendszerben,  $x$ -irányú elektromos teret kapcsolunk és  $y$ -, ill.,  $z$ -irányban szigetelővel vesszük körül, akkor izometrikus esetben

$$\begin{aligned} \bar{j}_x &= \bar{\sigma}_{xx} \bar{E}_x + \bar{\sigma}_{xy} \bar{E}_y + \bar{\sigma}_{xz} \bar{E}_z, \\ 0 &= \bar{\sigma}_{yx} \bar{E}_x + \bar{\sigma}_{yy} \bar{E}_y + \bar{\sigma}_{yz} \bar{E}_z, \\ 0 &= \bar{\sigma}_{zx} \bar{E}_x + \bar{\sigma}_{zy} \bar{E}_y + \bar{\sigma}_{zz} \bar{E}_z, \end{aligned} \quad (5.49)$$



amelyek alapján a tértöltés által létrehozott  $\bar{E}_y$  és  $\bar{E}_z$  elektromos tér már kiszámítható, de nem tévesztendő össze a Hall-feszültséggel, hiszen mágneses teret nem is alkalmaztunk. Így pl. szokás az irodalomban [pl. 22, 23] kétféle Nernst-effektusról beszélni, amelyek azonban az általunk klasszifikált Ettingshausen és Ettingshausen—Nernst effektusokban már bent foglaltatnak, ha az előbbi táblázat első két oszlopában szereplő vektoroknak csupán  $x$ -konponenseit vesszük figyelembe és a mágneses térről feltesszük, hogy  $z$ -irányú.

Szokásos még beszélni a különböző effektusok izotermikus és adiabatikus változatáról. Ha azonban nem engedjük meg az olyan kijelentéseket, mint például:  $x$ -irányban izotermikus, azaz  $\partial T/\partial x = 0$ , vagy  $y$ -irányban adiabatikus, azaz  $\bar{w}_y = 0$ , akkor nyilván csak tiszta elektromos, vagy galvano-mágneses effektusok esetén van értelme ilyen megkülönböztetést tenni. Más szóval, a fenti megállapodást elfogadva, csak a vezetőképesség és a Hall-effektus tenzorokat kell izotermikus és adiabatikus esetre megadni. Ezeket a számításokat a teljesség kedvéért elvégezzük.

A (4.26) összefüggéssel már definiáltuk az izotermikus elektromos vezetőképességet, számítsuk ki most az adiabatikus vezetőképesség tenzorát. Definíció-szerűen

$$\bar{Q}_a \bar{J}_e = -\frac{1}{e} \frac{\partial \mu}{\partial \bar{r}} \quad \text{ha} \quad \bar{w} = 0, \quad (5.50)$$

ahol bevezettük a

$$\bar{Q}_a = \bar{\sigma}_a^{-1} \quad (5.51)$$

adiabatikus ellenállás tenzort. Most tekintettel a (4.35) és (4.36) összefüggésekre

$$\bar{Q}_a = \bar{Q}_{\text{izoterm}} + \frac{T}{e} \bar{S} \bar{\kappa}^{-1} \bar{S}^+, \quad (5.52)$$

ahol természetesen az izotermikus ellenállás tenzor

$$\bar{Q}_{\text{izoterm}} = \bar{\sigma}^{-1}. \quad (5.53)$$

Az értelmezés világos: ha valamilyen módon akadályozzuk a hőáramot — például megfelelő hőmérsékletgradiens bekapcsolásával —, akkor ez elektromos szempontból úgy jelentkezik, hogy az izotermikus ellenálláshoz egy járulékos tag adódik.

Adósak vagyunk még az izotermikus Hall-effektus tárgyalásával. Ebben az esetben nem törődünk azzal, hogy milyen hőáramok folynak, a  $\bar{J}_1$  járulékos áramnak csupán első három komponensét kívánjuk kompenzálni egy  $\bar{E}_1$  elektromos térrel, hiszen  $\bar{F}_1$  többi része izotermikus esetben zérus. Így tehát

$$-\bar{J}_1 = -\hat{A}_1 \bar{E}_0 \bar{H} = e \bar{L}_1 \bar{E}_1; \quad (\hat{A}_1)_{ijk} = \hat{A}_{ijk} \quad i, j, k = 1, 2, 3, \quad (5.54)$$

ahol (5.43) mintájára az  $\hat{A}$  mátrixot is négy almátrixra bontottuk. Bevezetve az izotermikus Hall-együttható tenzort

$$\hat{R}_{\text{izoterm}} = -\bar{L}_1^{-1} \hat{A}_1 \bar{L}_1^{-1}, \quad (5.55)$$

a Hall-feszültségnek megfelelő elektromos teret a szokásos alakban írhatjuk

$$e \bar{E}_1 = \hat{R}_{\text{izoterm}} \bar{J}_0 \bar{H}. \quad (5.56)$$

Az  $\hat{R}$  izoterm és  $\hat{R}_i$  mátrixok közötti kapcsolat is könnyen megadható, ha az (5.47) összefüggésben az izotermikus hőáramot helyettesítjük (4.36) alapján

$$e\bar{E}_1 = (\hat{R}_1 + T\hat{R}_2\bar{S}^+)j_0\bar{H}; \quad \hat{R}_{\text{izoterm}} = \hat{R}_1 + T\hat{R}_2\bar{S}^+. \quad (5.57)$$

Az adiabatikus és izotermikus Hall-együtthatók között az ellenállásokhoz hasonló kapcsolat áll fenn.

Amint az (5.39) egyenlet alapján láttuk, valamelyik főtengety irányába mutató erő esetén a mágneses térben is elsőrendű tag az áram kifejezésében merőleges a primér áramra. Ez annyit jelent, hogy az ún. mágneses ellenállás változás nem elsőrendű effektus, azaz a mágneses tértől nem lineárisan függ. Ha erről az effektusról is számot akarunk adni, akkor a mágneses térben kvadratikus tagot is figyelembe kell venni. Ekkor általában a hatos áram

$$\tilde{J} = \tilde{L}\tilde{F} + \hat{A}\tilde{F}\bar{H} + \hat{B}\tilde{F}\bar{H}^2. \quad (5.58)$$

Ha most izotermikus esetben csupán az elektromos áram másodrendű járuléka érdekel minket, akkor a  $\hat{B}$  mátrixot a már többször alkalmazott módon négy al-mátrixra bontva

$$\bar{J}_{e2} = e^2 \hat{B}_1 \bar{E} \bar{H}^2 = \bar{\bar{B}} \bar{E}, \quad (5.59)$$

ahol a most bevezetett  $\bar{\bar{B}}$  hármasszoros tenzor mátrixának egy eleme

$$\bar{\bar{B}}_{il} = e^2 \sum_{j,k=1}^3 \hat{B}_{ijkl} \bar{H}_k \bar{H}_j = \bar{\bar{B}}_{li}, \quad (5.60)$$

azaz a tenzor természetesen szimmetrikus, és az (5.33) integrál alapján meghatározható.

A gyakorlati számítások általában a most követett módszerre, azaz a  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  sorfejtésére korlátozódnak. Elvi megfontolások esetén, vagy abban a szerencsés helyzetben, ha sikerül a  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényt előállítani, akkor az  $\tilde{L}(\bar{H})$  vezetési együtthatókat az (5.21) integrál szolgáltatja. Ebben az esetben a lineáris közelítés során az előző fejezetben talált összefüggéseket használhatjuk formálisan az áramok meghatározására, de most természetesen  $\bar{\sigma}$ ,  $\bar{\kappa}$  és  $\bar{S}$  a mágneses térnek is függvényei.

Eltekintve attól, hogy az elektromos térben és hőmérsékletgradiensben elsőrendű közelítést alkalmaztunk az utolsó két fejezetben, tárgyalásunk teljesen általános volt. Ismeretes, hogy relaxációs idő bevezetésével az eredmények egyszerűbb alakúak. A következő fejezetben ezt a problémát vizsgáljuk meg.

## 6. Relaxációs idő közelítés

A szilárdtestek vezetési jelenségeinek tárgyalása során az irodalomban gyakran alkalmazott eljárás az ún. relaxációs idő közelítés. Ez alatt a legegyszerűbb esetekben azt értik, hogy az (1.4) ütközési integrált a

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ütk}} = - \frac{f - f_0}{\tau(\bar{k})} \quad (6.1)$$



formulával helyettesítik, ahol a  $\tau(\bar{k})$  skalár relaxációs időre általában a mérési eredmények alapján következtetnek. Nyilvánvaló, hogy az (1.4) alatti bonyolult szerkezetű integrál ilyen egyszerű alakkal történő helyettesítése tetszőleges  $\tau(\bar{k})$  függvényt feltételezve is, csak nagyon speciális feltételek esetén lehetséges. Általános megoldásunk birtokában éppen ezeket a feltételeket akarjuk megvizsgálni.

Gondolatmenetünk a következő lesz; a tapasztalat azt mutatja, hogy ha a (6.1) egyenletben szereplő skalár relaxációs időt például elektromos-, vagy hővezetési mérések alapján határozzák meg, akkor az így kapott eredmények általában nem egyeznek egymással. Ezért célszerűnek látszik valamilyen általánosabb relaxációs idő fogalmat bevezetni. Ha megvizsgáljuk a vezetési együtthatók lineáris közelítésben érvényes (4.16) összefüggését, vagy a mágneses teret is lineárisan figyelembe vevő (5.32) kifejezést, akkor arra a következtetésre juthatunk, hogy ezeket egyszerűbb alakban lehet írni, ha bevezetjük a következő matematikai helyettesítést:

$$\bar{\tau}^{(1)}\bar{v} = -\frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \bar{v}' \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}', \quad (6.2)$$

$$\bar{\tau}^{(2)}\bar{v} = -\frac{8\pi^3 T_0}{V(E-\zeta)} \int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} (E' - \zeta) \bar{v}' \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'.$$

Összefoglalva a  $\bar{\tau}^{(1)}$  és  $\bar{\tau}^{(2)}$  hárnas tenzorokat egy hatos tenzorba:

$$\tilde{\tau} = \begin{pmatrix} \bar{\tau}^{(1)} & \bar{0} \\ \bar{0} & \bar{\tau}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (6.2a)$$

$$\tilde{\tau} \tilde{V} = -\frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'.$$

Ezzel definiáltuk a  $\tilde{\tau}(\bar{k})$  relaxációs idő hatos-tenzort, ami pillanatnyilag még csak azt a célt szolgálja, hogy segítségével néhány vezetési együttható integrálban a  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  Green-függvény helyett, annak bizonyos (6.2) típusú „átlagértékét” tudtuk bevezetni. A definíció még nem teljes, hiszen a (6.2) vektor-egyenlet hat egyenletnek felel meg, amely csak akkor határozza meg a  $\tilde{\tau}$  tenzor 18 elemét, ha megköveteljük, hogy az szimmetrikus legyen és a (6.2) definiáló egyenlet a főtenzelyrendszerben érvényes. Ez a főtenzelyrendszer legyen azonos azzal, amelyben a (4.27) alatt meghatározott  $\bar{\sigma}$  elektromos vezetőképesség tenzora diagonális. Köbös kristály esetén például ez természetesen a kristály tengelyrendszerével esik egybe. Az így most már egyértelműen meghatározható relaxációs idő tenzorral a vezetési együtthatók valóban egyszerűbben írhatók, hiszen (4.16) helyett

$$\tilde{L} = -\frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tilde{V} \circ \tilde{V}) \tilde{\tau} d^3 \bar{k}, \quad (6.3)$$

illetve (5.32) helyett

$$\hat{A} = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar^2 c} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tilde{\tau} \tilde{V} \circ \bar{\omega} \circ \tilde{\tau} \tilde{V}) d^3 \bar{k}. \quad (6.4)$$

Ezután két kérdés merül fel; egyrészt milyen feltételek mellett lehet a relaxációs idő tenzor helyett skalár relaxációs időről beszélni, másrészt ezeket a relaxációs idő mennyiségeket — vagy a tenzort, vagy a skalárt — mikor lehet közvetlenül a Boltzmann-egyenletbe helyettesíteni a (6.1) összefüggéshez hasonló módon. Ha ilyen helyettesítés lehetséges, akkor természetesen a vezetési együtthatók is tartalmazni fogják a megfelelő relaxációs idő mennyiségeket. Fordítva persze nem érvényes az állítás; ha a vezetési együtthatókban valamilyen helyettesítés elvégezhető, az nem biztos, hogy ugyanúgy alkalmazható a kiindulásként szereplő Boltzmann-egyenletben is. Érdeklődve várjuk, hogy a felvetett kérdésekre a feleletet a kristály mikroszkopikus tulajdonságai határozzák-e meg, vagy az, hogy az alkalmazott (3.19) sorfejtésben milyen rendű közelítésig megyünk el, esetleg mindkettő szerepet játszik a relaxációs idő bevezethetőségében.

Mindenekelőtt az első kérdésre adunk választ. A G. függelékben bebizonyítjuk a következő lemmát:

5. *Lemma:* A (6.2) integrállal definiált relaxációs idő tenzor akkor írható a

$$\tilde{\tau} = \tau \mathbf{1} \quad (6.5)$$

alakban, azaz akkor helyettesíthető skalár relaxációs idővel, ha a normált  $V(\bar{k}, \bar{k}')$  szimmetrizált átmeneti valószínűség ortogonális a  $\tilde{V}' \cdot \partial f'_0 / \partial E'$  függvényre, azaz

$$\int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})} d^3 \bar{k}' = 0 \quad (6.6)$$

és ekkor

$$\tau = - \frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{1}{V(\bar{k})}. \quad (6.7)$$

Ezek szerint kizárólag a kristály mikroszkopikus tulajdonságaira jellemző  $V(\bar{k}, \bar{k}')$  függvénytől függ, hogy a relaxációs idő tenzor helyett mikor beszélhetünk skalár relaxációs időről. Rögtön szeretnénk egy példát mutatni arra, hogy milyen típusú szórási mechanizmusok esetén teljesül a (6.6) ortogonalitási feltétel. Tegyük fel, hogy az elektron a  $\bar{k}$  állapotból azonos valószínűséggel szóródik a  $+\bar{k}'$  és  $-\bar{k}'$  állapotokba, azaz az átmeneti valószínűsége fennáll az

$$W(\bar{k}, \bar{k}') = W(\bar{k}, -\bar{k}') \quad (6.8)$$

összefüggés, de akkor (3.6) alapján

$$V(\bar{k}, \bar{k}') = V(\bar{k}, -\bar{k}'), \quad (6.9)$$

amely utóbbi szerint a (6.6) integrandusza páratlan függvény lesz, hiszen a hatossebesség  $\bar{k}$ -nak páratlan függvénye, és így az integrál zérust eredményez. Megjegyezzük itt, hogy ez a szórási kép sok félvezető esetén nagyon jó közelítésnek tekinthető.

Abban az esetben, ha a kristályban uralkodó szórási mechanizmus összhangban van a (6.6) ortogonalitási relációval, akkor egyidejűleg a következő ortogo-



nalitási összefüggések is teljesülnek:

$$\int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \Gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' = 0, \quad (6.10)$$

$$\int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \frac{\Gamma(\bar{k}', \bar{k})}{V(\bar{k}')} d^3 \bar{k}' = 0, \quad (6.11)$$

amint azt a G. függelékben szintén beláttuk.

Most rátérünk a második kérdés vizsgálatára és először a lineáris közelítés keretein belül nézzük meg, hogy relaxációs idő közvetlenül a Boltzmann-egyenletbe helyettesíthető-e. Általános esetben a Boltzmann-egyenletet (3.27) és (3.13) alapján a következő alakban írhatjuk fel

$$\sum_{N=1}^{\infty} \hat{A}_N \hat{F}^N = \frac{8\pi^3 T_0}{V} I. \quad (6.12)$$

Mint a fejezet elején már (6.1)-ben felírtuk, a legegyszerűbb relaxációs idő közelítések feltételezik, hogy az ütközési integrál a következő

$$I = -\frac{f-f_0}{\tau} \quad (6.13)$$

alakban írható. Az  $f$  eloszlásfüggvény konkrét ismeretében ellenőrizhetjük, hogy ez a helyettesítés jogos-e és látni fogjuk, hogy az általunk definiált relaxációs idővel ezt tényleg meg lehet csinálni, ha bizonyos feltételek teljesülnek.

Lineáris közelítésben a (6.12) egyenletet így írhatjuk

$$\hat{A}_1 \hat{F} = \frac{8\pi^3 T_0}{V} I, \quad (6.14)$$

ahol természetesen az ütközési integrálból is csak az elsőrendű tagokat kell figyelembe venni. Az egyenlet bal oldalát a (3.24), illetve (4.9) és (4.12) összefüggések figyelembevételével átalakíthatjuk

$$\hat{A}_1 \hat{F} = \frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{\partial f_0}{\partial E} \tilde{V} \tilde{F}. \quad (6.15)$$

Most megpróbáljuk a (6.13) ütközési integrál helyettesítést érvényesíteni, de nem skálár, hanem általánosabb relaxációs idő kifejezéssel, azaz megpróbáljuk a (6.14) Boltzmann-egyenletet a következő alakban felírni:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} (\tilde{\tau} \tilde{V}) \tilde{F} = -(f-f_0). \quad (6.16)$$

A jobb oldalt (4.10), illetve az elsőrendű közelítésben érvényes (4.13) megoldás alapján helyettesítve azt találjuk, hogy az egyenlet kielégül, ha bal oldalra a (6.2) alatt definiált relaxációs idő tenzort írjuk. Következésképpen a Boltzmann-egyenlet elsőrendű közelítésben mindig fel lehet írni a (6.16) alakban, tehát egy relaxációs idő tenzor segítségével, amelynek a bevezetése tehát újabb közelítést nem

jelent. Ha ezen túlmenően a kristályban a szórási mechanizmus a (6.6) ortogonalitási relációval összeegyeztethető, vagy közelítőleg feltételezhető ilyen szórási mechanizmus — és ez már lehet újabb közelítés — akkor a tenzor helyett skalár relaxációs idő vezethető be és az ütközési integrál valóban a (6.13) alakú lesz. A vezetési együtthatókat elsőrendű közelítésben általában a (6.3) összefüggés szolgáltatja, illetve a (6.6) ortogonalitási relációval összeegyeztethető szórási mechanizmus esetén

$$\tilde{L} = -\frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(\bar{k}) (\tilde{V} \circ \tilde{V}) d^3 \bar{k}, \quad (6.17)$$

amely már teljes mértékben egyezik az irodalomban — pl. [13] — használatos kifejezésekkel. Vegyük észre, hogy a relaxációs idő tenzor bevezetése csak formai egyszerűsítést jelent, hiszen a (6.2) definiáló összefüggésben szerepel a  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  függvény, amelynek meghatározása eddig is a problémát jelentette. Ha skalár relaxációs időről beszélhetünk, akkor a  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  Green-függvény konkrét ismertetére nincs szükségünk a vezetési együtthatók meghatározása céljából.

Ha most tovább megyünk és az elektromos térben és hőmérséklet gradiensben lineáris tagok mellett a mágneses tér hatását is figyelembe vesszük, akkor a Boltzmann-egyenletet így írhatjuk:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \tilde{V} \tilde{F} + \frac{1}{\hbar c} [\bar{v} \times \bar{H}_0] \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{k}} = I, \quad (6.18)$$

amit legkönnyebben a (3.12) egyenlet alapján láthatunk be. Bevezetve a (3.26) jelölést és felhasználva az (5.8) egyenlőséget, az előbbi (6.18) egyenletet átalakítjuk és a következő formában írhatjuk:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \tilde{V} \tilde{F} - \frac{1}{\hbar^2 c} (\bar{H}_0 \bar{\omega}) \Phi \right\} = I, \quad (6.19)$$

vagy továbbmenően felhasználva az (5.18) egyenlőséget és bevezetve a

$$\tilde{G} = \frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' G(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' \quad (6.20)$$

jelölést, egyenletünk így alakul

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \tilde{V} - \frac{1}{\hbar^2 c} (\bar{H}_0 \bar{\omega}) \tilde{G} \right\} \tilde{F} = I. \quad (6.21)$$

Hasonlóan mint a lineáris közelítés esetén tettük, az ütközési integrál helyett vezessünk be relaxációs idő tenzort és próbálkozzunk a (6.21) Boltzmann-egyenlet helyett a következő formával

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \tilde{\tau} \left( \tilde{V} - \frac{1}{\hbar^2 c} (\bar{H}_0 \bar{\omega}) \tilde{G} \right) \right\} \tilde{F} = -(f - f_0). \quad (6.22)$$

Az eredeti Boltzmann-egyenlet megoldásának birtokában ellenőrizni fogjuk, hogy ez a felírás mikor, milyen feltételek mellett helyes. Valójában ezt a megoldást már felhasználtuk az (5.18) egyenlőség alkalmazásával, így azt kell vizsgálnunk, hogy



milyen körülmények között nem vezet (6.22) ellentmondásra. Alkalmazzuk ismét az (5.18) egyenlőséget és a (6.20) jelölést

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \tilde{\tau} \left\{ \tilde{V} - \frac{1}{\hbar^2 c} (\bar{H}_0 \bar{\omega}) \tilde{G} \right\} = - \frac{\partial f_0}{\partial E} \tilde{G}. \quad (6.23)$$

Tekintettel a  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényt definiáló (5.17) és (5.15) összefüggésekre

$$\begin{aligned} \tilde{G} &= \frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \sum_{N=1}^{\infty} (\bar{H}_0 \bar{\Omega})^{N-1} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' = \\ &= \frac{8\pi^3 T_0}{V} \left\{ \int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' + \int \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \tilde{V}' \sum_{N=2}^{\infty} (\bar{H}_0 \bar{\Omega})^{N-1} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' \right\}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Ha ezt a (6.23) egyenlet jobb oldalába helyettesítjük, akkor figyelembe véve a  $\tilde{\tau}$  tenzor (6.2) definícióját, az első tagok megegyeznek, így marad

$$\begin{aligned} \tilde{\tau} (\bar{H}_0 \bar{\omega}) \tilde{G} &= - \left( \frac{8\pi^3 T_0}{V} \right)^2 \iint \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \frac{\partial f''_0}{\partial E'} \cdot \\ &\cdot \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \tilde{V}' (\bar{H}_0 \bar{\omega}'') G(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}'', \end{aligned} \quad (6.25)$$

ahol a jobb oldal második tagjában új összegező indexet vezettünk be és ismét figyelembe vettük az (5.17), illetve (5.10) összefüggéseket. Vezessünk be most új jelölést

$$(\bar{H}_0 \bar{\omega}) \tilde{G} = \tilde{K} \quad (6.26)$$

és ekkor, ha (6.20) összefüggést is felhasználjuk, az előbbi (6.25) így írható:

$$\tilde{\tau} \tilde{K} = - \frac{8\pi^3 T_0}{V} \int \frac{\partial f''_0}{\partial E''} \tilde{K}'' \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') d^3 \bar{k}''. \quad (6.27)$$

Ez az egyenlet teljesen analóg a  $\tilde{\tau}$  tenzort definiáló (6.2) összefüggéssel, csak az ottani  $\tilde{V}$  hatos sebesség helyett itt egy  $\tilde{K}$  hatos vektor van, amelyben a kristálytól független mennyiségek, például a  $H_0$  külső mágneses tér, is szerepelnek. Ugyanakkor a relaxációs idő tenzortól mi megkívánjuk, hogy kizárólag a kristályra jellemző, egyértelműen meghatározható mennyiség legyen, így tehát ellentmondásra jutottunk. Következésképpen az elektromos térben és hőmérséklet gradiensben lineáris, de a mágneses teret is figyelembe vevő Boltzmann-egyenlet általában nem írható fel relaxációs idő tenzor bevezetésével. Érdekes itt megjegyezni, hogy bár a Boltzmann-egyenlet nem írható fel relaxációs idő tenzorral, a vezetési együtthatók közül az, amelyik a mágneses teret is csak lineárisan tartalmazó taggal kapcsolatos, felírható relaxációs idő tenzorral, mint azt (6.4)-ben már láttuk.

Kérdéses még, hogyan módosulnak eredményeink, ha skalár relaxációs idő vezethető be, azaz a szórási mechanizmus a kristályban összeegyeztethető a (6.6) ortogonalitási relációval. Ennek a feltételnek a következményeit részletesebben kicsit később, a teljesen általános, tetszés szerinti rendű közelítés tárgyalásával kapcsolatban vizsgáljuk meg. Ott látni fogjuk, hogyha skalár relaxációs idővel írjuk fel a Boltzmann-egyenletet, akkor egy ún. ekvivalens egyenletet kapunk,

amelynek megoldása egy, a hatos  $\tilde{V}$  sebességre ortogonális tagtól eltekintve megegyezik az eredeti Boltzmann-egyenlet megoldásával. Ez a bizonyos ortogonális tag a hatos áramhoz nem ad járulékot, hiszen a

$$\tilde{J} = \frac{1}{4\pi^3} \int \tilde{V}(f_{ekv} + f_{ort}) d^3 \bar{k} \quad (6.28)$$

integrál második tagja éppen az ortogonalitás miatt eltűnik.

Ebben a mágneses tértől eltekintve lineáris esetben skalár relaxációs idővel az eloszlásfüggvény is egyszerűen meghatározható, ugyanis a Boltzmann-egyenlet (6.19) alakja helyett a következő

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \tilde{V} \tilde{F} - \frac{1}{\hbar^2 c} (\bar{H} \bar{\omega}) \Phi \right\} = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\Phi}{\tau} \quad (6.29)$$

ekvivalens egyenlet játszik szerepet, amelyben és a fejezet további részében mindenütt az „ $ekv$ ” indexet elhagytuk és amelynek megoldása

$$\Phi = - \sum_{N=0}^{\infty} \left( \frac{e\tau}{\hbar^2 c} \bar{H} \bar{\omega} \right)^N \tau \tilde{V} \cdot \tilde{F}, \quad (6.30)$$

amiről behelyettesítéssel könnyen meggyőződhetünk. A hatos áram (4.8) szerint

$$\tilde{J} = -\frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \tilde{V} \circ \sum_{N=0}^{\infty} \left( \frac{e\tau}{\hbar^2 c} \bar{H} \bar{\omega} \right)^N \tau \tilde{V} \right\} d^3 \bar{k} \cdot \tilde{F}. \quad (6.31)$$

Ezek szerint a vezetési együtthatók most (5.23) helyett

$$\tilde{L}(\bar{H}) = -\frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \tilde{V} \circ \sum_{N=0}^{\infty} \left( \frac{e\tau}{\hbar^2 c} \bar{H} \bar{\omega} \right)^N \tau \tilde{V} \right\} d^3 \bar{k}, \quad (6.32)$$

illetve, ha a mágneses tér szerint sorbafejtett alakot használjuk, akkor (5.30) helyett

$$\hat{C}_{N+2} = -\frac{e^N}{4\pi^3 \hbar^{2N} c^N} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tilde{V} \circ \{\tau \bar{\omega}\}_0^N \circ \tau \tilde{V}) d^3 \bar{k}, \quad (6.33)$$

ahol a kapcsos zárójel alsó indexe arra utal, hogy a hatványraemelés valójában  $N$ -szeres diadikus szorzást jelent. Az  $N=1, 2, 3$  esetekben megfelelő együttható mátrixokat részletesen is felírjuk

$$\hat{C}_2 = \tilde{L} = -\frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau (\tilde{V} \circ \tilde{V}) d^3 \bar{k}, \quad (6.34)$$

$$\hat{C}_3 = \hat{A} = -\frac{1}{4\pi^3} \frac{e}{\hbar^2 c} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tau \tilde{V} \circ \bar{\omega} \circ \tau \tilde{V}) d^3 \bar{k}, \quad (6.35)$$

$$\hat{C}_4 = \hat{B} = -\frac{1}{4\pi^3} \left( \frac{e}{\hbar^2 c} \right)^2 \int \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tau \tilde{V} \circ \bar{\omega} \circ \tau \bar{\omega} \circ \tau \tilde{V}) d^3 \bar{k}. \quad (6.36)$$

Az első a mágneses tértől mentes esetnek felel meg és természetesen megegyezik (6.17)-el. A második kifejezés a mágneses térben is lineáris esetnek felel meg és az (5.32), illetve a (6.4) összefüggés megfelelője, ha skalár relaxációs időről lehet beszélni.



A harmadik kifejezés már a mágneses tér négyzetével arányos effektusokat írja le és az előbbihez hasonlóan az (5.33) összefüggés megfelelője. Mint már megjegyeztük, ebben az esetben általános relaxációs idő tenzor nem vezethető be, így ha skalár relaxációs időről nem lehet beszélni, akkor mindig a  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  Green-függvényt tartalmazó (5.33) egyenlettel kell számolni a vezetési együtthatókat. Megjegyezzük itt, hogy a (6.34)–(6.36) összefüggések teljesen megegyeznek Jones [13] megfelelő kifejezéseivel, amint az várható is volt, hiszen Jones kezdettől fogva skalár relaxációs időt feltételezve számolt.

Hátra van még a legáltalánosabb eset tárgyalása, amikor tetszés szerinti rendű közelítésben érvényes eredményeket akarunk kapni az elektromos tér és hőmérséklet gradiensre vonatkozólag is. Ebben az esetben a relaxációs idő tenzor bevezetésével nem is próbálkozunk, hanem annak feltételét vizsgáljuk, hogy skalár relaxációs idővel mikor lehet a Boltzmann-egyenletet felírni. Mindenesetre feltételezzük a (6.6) ortogonalitási relációt. Ezen kívül két feltétel közül az egyiknek kell teljesülnie; vagy olyan a szórási mechanizmus, hogy az elektronok energiája nem változik, azaz

$$V(\bar{k}, \bar{k}') \sim \delta(E - E'), \quad (6.37)$$

vagy az elektronok kezdeti eloszlása a Fermi–Dirac-függvény helyett a klasszikus Boltzmann-eloszlással írható le. Akármelyik feltétel teljesül a kettő közül, a (3.13) alakú ütközési integrálban a  $\Phi\Phi'$  szorzattal arányos tagok nem fognak fellépni és végeredményben a Boltzmann-egyenletnek megfelelő (3.27) egyenlet megoldása (3.32) helyett a következő egyszerűbb alakban írható

$$\hat{\Phi}_N = \int \hat{A}_N(\bar{k}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (6.38)$$

Meg kell itt említenünk, hogy az idézett két feltétel közül bármelyik csak közelítőleg lehet érvényes egy reális szilárdtestben, hiszen egyrészt, ha az elektronok ütközésük során nem adnának át energiát a kristályrácsnak, akkor energiájuk a külső tér hatására egyre növekedne, ami katasztrófára vezetne, másrészt az elektronok a kvantummechanika törvényeinek alávetett részecskékké, így kezdeti eloszlásukat klasszikusan nem lehet leírni. Ezek ellenére bizonyos esetekben a tett feltevések közül egyik vagy másik jó közelítésnek tekinthető. Így például nem túl erős perturbációk esetén az említett katasztrófa csak nagyon sokára következne be, vagy félvezetők esetén a klasszikus közelítés sokszor kielégítő.

A kísérleti fizikus számára elsősorban az áramok és nem az eloszlásfüggvény bír fizikai realitással, így megelégedhetünk a Boltzmann-egyenlet egy olyan ekvivalens alakjával, amely az áramokra vonatkozóan az eredeti egyenlettel azonos eredményre vezet. Írjuk fel a hatos áram kifejezését a (4.8) és (6.38) összefüggések figyelembevételével

$$\tilde{J} = \frac{1}{4\pi^3} \sum_{N=1}^{\infty} \int \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tilde{V} \hat{A}_N \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' \cdot \hat{F}^N, \quad (6.39)$$

de ez, mivel feltételeztük, hogy skalár relaxációs időről beszélhetünk, a (6.11) ortogonalitási relációt kihasználva egyszerűbben írható

$$\tilde{J} = \frac{1}{4\pi^3} \sum_{N=1}^{\infty} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tilde{V} \hat{A}_N \frac{1}{V(\bar{k})} d^3 \bar{k} \cdot \hat{F}^N. \quad (6.40)$$

Ugyanerre az áram kifejezésre jutunk, ha feltételezzük, hogy a megoldás (6.38) helyett a következő alakú

$$\hat{\phi}_N = \frac{\hat{A}_N}{V(\bar{k})}, \quad (6.41)$$

azaz olyan, mintha a  $\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  az  $\hat{A}_N$ -re is ortogonális volna. A Boltzmann-egyenlet helyett tehát olyan ekvivalens egyenletet adhatunk meg, amelynek megoldása (6.41) alakú. Megmutatjuk, hogy ha a (6.12) Boltzmann-egyenletben az ütközési integrált relaxációs idővel írjuk fel a (6.13) formában, azaz

$$\sum_{N=1}^{\infty} \hat{A}_N \hat{F}^N = -\frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (6.42)$$

akkor éppen egy ekvivalens egyenlethez jutunk. Ugyanis helyettesítsük a jobb oldalra a relaxációs időnek megfelelő kifejezést (6.7) alapján, továbbá a (3.19) sorfejtést, akkor

$$\sum_{N=1}^{\infty} \hat{A}_N \hat{F}^N = V(\bar{k}) \sum_{N=1}^{\infty} \hat{\phi}_N \hat{F}^N \quad (6.43)$$

és ez azonosságba megy át a (6.41) megoldás figyelembevételével. Ilyen feltételek mellett az eloszlásfüggvényt is könnyen felírhatjuk, hiszen a (3.20) sorfejtés egy tagja a (3.21), (6.41), (3.24) és (6.7) összefüggéseket figyelembe véve

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_N \hat{F}^N &= \frac{\partial f_0}{\partial E} \hat{\phi}_N \hat{F}^N = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{1}{V(\bar{k})} \hat{A}_N \hat{F}^N = \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{1}{V(\bar{k})} (\hat{\Psi} \hat{\phi}_{N-1}) \hat{F}^N = -\tau (\hat{\Psi} \hat{F}) \hat{\phi}_{N-1} \hat{F}^{N-1} = \\ &= (-\tau \hat{\Psi} \hat{F})^2 \hat{\phi}_{N-2} \hat{F}^{N-2} = \dots = (-\tau \hat{\Psi} \hat{F})^N f_0. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Ezzel (3.20) alapján az eloszlásfüggvény

$$f = \sum_{N=0}^{\infty} (-\tau \hat{\Psi} \hat{F})^N f_0, \quad (6.45)$$

amelynek ismeretében most már az áramok, vagy a vezetési együtthatók tetszés szerinti rendben felírhatók.

Összefoglalásul megállapíthatjuk, hogy függetlenül attól, hogy a külső perturbációk szerint történő sorfejtésben milyen rendű közelítésig megyünk el, a Boltzmann-egyenlet skalár relaxációs idővel felírható, azaz az ütközési integrál (6.13) alakkal helyettesíthető, ha 1. a kristály belső szórási mechanizmusa a (6.6) ortogonalitási relációval összhangban volt, 2. az ütközési integrál az eloszlásfüggvényben lineáris, ami természetesen csak közelítőleg lehet igaz, és 3. megelégszünk egy ekvivalens Boltzmann-egyenlettel, ami az áramok szempontjából az eredeti egyenlettel azonos eredményre vezet. Míg az 1. és 3. feltétel megengedné, hogy a vezetési folyamatok leírása bizonyos körülmények között skalár relaxációs idővel egzakt módon lehetséges legyen, addig a 2. feltétel miatt most határozottan relaxációs idő közelítésről kell beszélni. Megemlítjük, hogy ha az elektromos tér és hőmérséklet gradiens szerint elsőrendű közelítésre korlátozzuk magunkat, akkor a 2. feltétel automati-



kusan teljesül és így a skalár relaxációs idővel történő leírás nem feltétlenül jelent újabb közelítést, mint azt az előzőekben láttuk is.

Végül felmerül a kérdés, hogy más módon definiált relaxációs idő fogalmak vajon nem építhetők-e be szerencsésebben a szilárdtestek vezetési jelenségeinek elméletébe. Néhány próbálkozással találkozhatunk az irodalomban. Így például *Schottky* [24], akinek módszere a mienkhez sok tekintetben hasonló, a vezetési jelenségek tárgyalására a következő elgondolást javasolta. Gondolatait az általunk már eddig használt jelölések segítségével tolmácsoljuk. — Tekintsük a (3.27) alatt felírt Boltzmann-féle transzport egyenletet, hagyjuk el az egyszerűség okából az ütközési integrál non-linearitását okozó tagokat és keressük a megoldást

$$\hat{\Phi}_N = \hat{A}_N \hat{\tau}_N \quad (6.46)$$

alakban, ahol bevezettünk egy általánosított relaxációs idő tenzort és a szorzási szabály a következőképpen van definiálva:

$$\hat{\Phi}_N^{i_1, i_2, \dots, i_N} = \hat{A}_N^{i_1, \dots, i_N} \hat{\tau}_N^{i_1, \dots, i_N}. \quad (6.47)$$

Ha a (6.46) kifejezést a (3.27) transzport egyenletbe helyettesítjük, akkor a relaxációs idő meghatározására a következő integrálegyenletet kapjuk

$$\frac{1}{\hat{\tau}_N} = \int \left( 1 - \frac{\hat{A}_N' \hat{\tau}_N'}{\hat{A}_N \hat{\tau}_N} \right) V(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' \quad (6.48)$$

amely szimbolikusan van felírva, mert a mátrixok helyett azok elemeit, pontosabban ugyanazon indexű elemeit kell érteni. Ez az egyenlet a *Schottky* idézett [24] közleményében található egyenlet némileg általánosított formája. Látható, hogy ebben a tárgyalásban a sorfejtési együttható mátrixok helyett szerepelnek „relaxációs idő tenzor”-ok a (6.46) kapcsolat alapján és — véleményünk szerint — ilyen értelemben használni a relaxációs idő fogalmat túl általános, továbbá nem rendelkezik azzal a tulajdonsággal, hogy bizonyos egyszerűbb esetekben az átmeneti valószínűség reciprokéval arányos, mint azt esetünkben a skalár relaxációs idő (6.7) szerint teljesíti.

Hasonló megfontolások alapján definiál relaxációs idő tenzorokat *Herring* is [25], aki az  $f - f_0$  eloszlásfüggvény megváltozást fejtő gömbfüggvények szerint sorba és a sorbafejtési együtthatókkal kapcsolatban vezeti be a relaxációs időket. Ugyanezekben a közleményekben vizsgálja *Herring* annak feltételét, hogy skalár relaxációs időről lehessen beszélni és az általunk is említett (6.8) elégséges feltételt találja a nálunk általánosabban fogalmazott (6.6) ortogonalitási reláció helyett.

A következő fejezetben röviden összefoglaljuk a Boltzmann-egyenlet megoldásával kapcsolatos és a relaxációs idő közelítés érvényességi tartományára vonatkozó eredményeinket és vázoljuk azokat a feladatokat, amelyek megoldása után konkrét, tapasztalattal összehasonlítható eredményeket nyerhetünk.

## 7. Összefoglalás

Szilárdtestek vezetési tulajdonságaival foglalkoztunk elméletileg és kiindulási alapként az (1.5) alakú Boltzmann-féle transzport egyenletet tekintettük. Ennek az egyenletnek a levezetésével részleteiben nem foglalkoztunk, csupán feljegyeztük azokat a feltételeket, amelyek az egyenlet érvényességi tartományát korlátozzák.



A Boltzmann-egyenletben szerepelnek a kvantummechanikai elektront jellemző  $\vec{r}$  helyvektor és  $\vec{k}$  hullámszámvektor idő szerinti deriváltjai, amelyek értéke ugyan az irodalomból ismeretes volt, de a levezetések általában nem következetes kvantummechanikai módszerrel történtek és a mágneses tér magasabb rendű hatványait tartalmazó tagokat elhanyagolták, amit ugyanakkor meglehetősen szigorú — lásd a (2.34) egyenlőtlenséget — feltételhez kötöttek. Sikertült olyan levezetést adni, amely az említett nehézségeket elkerüli és rámutat arra, hogy a nyert eredmények érvényességi tartományát elsősorban az elektront reprezentáló hullámcsomag sajátságai korlátozzák, amely a kristályrács szerkezetével van közvetlen kapcsolatban.

A kérdéses időderiváltak ismeretében most már a Boltzmann-egyenletet teljesen általánosan fel tudtuk írni és a megoldást a külső perturbációk szerint haladó hatványsor alakjában kerestük. A megoldást tetszés szerinti rendben elő tudtuk állítani anélkül, hogy az energia-hullámszám összefüggésre, vagy az átmeneti valószínűségekre valamilyen megszorítást tettünk volna. Sem az ütközési integrál linearizálásához, sem valamilyen relaxációs idő közelítéshez nem kell folyamodnunk. A Green-függvény módszerrel nyert megoldás bizonyos értelemben formális, mert az egymásután lépésenként előállítható sorfejtési mátrixokat szolgáltatató integrálokban a Green-függvény ismeretlen. A Green-függvény meghatározására egy integrálegyenlet szolgál, amelyet a kristályra jellemző átmeneti valószínűség ismeretében valamilyen módszerrel meg kell oldani. Erre vonatkozóan általános megoldást nem sikerült adnunk, de a transzport elméletben szokásos variációs elvekhez [26] hasonló elvet a H. függelékben bebizonyítottunk. A variációs elvek nagy előnye, hogy alkalmazhatók a közelítő megoldások közül a legjobb megoldás kiválasztására, amint azt jelen esetre vonatkozóan is megmutatjuk az említett függelékben. Az általunk követett megoldási módszer nem egyedülálló az irodalomban, hiszen a Boltzmann-egyenlet alapján álló modernebb közlemények nagy része sorfejtéses módszerrel próbálkozik és a sorfejtési együtthatók meghatározását Fredholm-típusú integrálegyenletre vezetik vissza, ha nem alkalmaznak relaxációs idő közelítést. Így például Taylor [27], illetve Sondheimer [28] mind az ütközési integrált, mind az ún. „drift”-tagot lineáris közelítésben írja be a Boltzmann-egyenletbe és így a sorfejtésből maradó egyetlen tag együtthatóját, az általuk közepes vektor-szabadúthossznak nevezett mennyiséget határozzák meg egy integrálegyenlet alapján. Másrésztől Zukotynski és Kolodziejczak [29], illetve Zawadzki [30] elektromos térben, hőmérséklet gradiensben és koncentráció gradiensben lineárisan, de mágneses térben tetszés szerinti rendben tárgyalták a Boltzmann-egyenletet skalár relaxációs időt feltételezve. Eredményeik természetesen megegyeznek az általunk hasonló közelítésben kapott (6.32) összefüggésekkel. A fenti példák alapján is látható, hogy az általunk alkalmazott módszer elsősorban általánosságban tér el az irodalomban eddig használtaktól.

Bár a megoldáshoz szükséges Green-függvény konkrét előállítására dolgoztunkban nem került sor, a megoldás sok jellegzetes tulajdonságára tudtunk következtetni pusztán szimmetria megfontolások alapján, amelyek a kristályszerkezet közvetlen következményei voltak. Így például tárgyaltuk az általános megoldás alapján az elektromos térben és hőmérséklet gradiensben lineáris közelítést mind a mágneses tér figyelembevételével, mind anélkül és eredményeinkből azonnal adódtak az irreverzibilis termodinamikában alapvető szerepet játszó Onsager-relációk. Ezeknek a közelítéseknek az eredményei adtak lehetőséget az egyszerű



elektromos- és hővezetésen kívül a különböző kereszt-effektusok, termoelektromos-, galvanomágneses- és galvano-termomágneses-effektusok tárgyalására, amelyek ugyan az irodalomból jól ismertek, de a jellemző vezetési együtthatók és a kristályra jellemző mikroszkopikus mennyiségek között most egy mélyebb kapcsolatot sikerült feltárni. A különböző kereszt-effektusok tárgyalását igyekeztünk a szokásosnál egységesebb formában adni.

Az általános megoldás birtokában hozzáfoghattunk a relaxációs idő közelítés vizsgálatához. A (6.2) összefüggéssel definiáltunk egy relaxációs idő tenzort, amely mint matematikai helyettesítés bizonyos esetekben egyszerűbb alakra hozta az egyenleteket. Megállapítottuk, hogy ha a kristályban az elektronok belső szórási mechanizmusa bizonyos feltételeknek eleget tesz, pontosabban a (6.6) ortogonalitási relációval összeegyeztethető, akkor a relaxációs idő tenzor skalárrá degenerálódik. Kérdés volt, hogy ezen relaxációs idő mennyiségek közül egyik vagy másik milyen feltételek mellett vezethető be a számítások elején közvetlenül a Boltzmann-egyenletbe. Láttuk, hogy tenzor jellegű relaxációs idő csak akkor vezethető be, ha elsőrendű közelítésben írjuk fel a Boltzmann-egyenletet, de ebben az esetben a relaxációs idő tenzor bevezetése újabb közelítést nem jelent. Ha speciális szórási mechanizmus következtében skalár relaxációs időről beszélhetünk, akkor ez a  $\tau$  az általános esetben is bevezethető a Boltzmann-egyenletbe, ha egyrészt az ütközési integrált linearizáljuk, ami sok esetben jó közelítés, másrészt csak ekvivalens Boltzmann-egyenletet kívánunk felírni, azaz olyat, ami nem az eloszlásfüggvény, hanem az áramok szempontjából vezet az eredeti egyenlettel azonos eredményre. Ebben a közelítésben eredményeink a jól ismert irodalmi eredményekbe mennek át, míg különben általánosabb érvényűek.

Befejezésül néhány szót arról, milyen feladatokat kell még megoldani, hogy numerikus eredményeket kapjunk a vezetési együtthatókra. Elméletileg meg kell határozni a  $V(\vec{k}, \vec{k}')$  átmeneti valószínűséget különböző szóró centrumok — mint például rácshibák, szennyezések, rendezetlen, illetve rendezett anyag, vagy más fázishatárok stb. — jelenlétében, majd ennek ismeretében valamilyen módszerrel, esetleg a variációs elv felhasználásával közelítőleg, meg kell oldani a Green-függvényre vonatkozó integrálegyenletet. Ezután az  $E(\vec{k})$  energiahullámszám összefüggést kell még elméletileg meghatározni és ezek ismeretében a vezetési együtthatók integrálással kiszámíthatók. Meg kell jegyeznünk, hogy a kristályra jellemző  $V(\vec{k}, \vec{k}')$  és  $E(\vec{k})$  függvényekre vonatkozóan sok adat áll rendelkezésre az irodalomban, amelyek feldolgozása és továbbfejlesztése esetleg meg is oldaná a problémát, így semmi esetre sem járatlan területen kell a vizsgálatokat folytatni. Könnyebbé lehet okozhat az is, hogy ha a vezetési együtthatókat előállító integrálokra alkalmazzuk a Bethe—Sommerfeld sorfejtést, amikor is az  $E(\vec{k})$  függvényeket elegendő a Fermi-energiaérték közelében ismerni és ennek az ismeretnek a megszerzésére sok közvetlen kísérleti módszer is rendelkezésre áll, amelyeket összefoglalóan Fermi-felület feltérképezésnek nevezünk.

A feladatokkal kapcsolatban meg kell még említenünk a perturbációk szerint történt sorfejtés konvergenciájának problémáját, amely ugyan tisztán matematikai feladat, de esetleg bizonyos megszorításokat adna az alkalmazott megoldási módszer érvényességi határával kapcsolatban. Másrésztől nem szabad elhanyagolnunk a vezetési jelenségek elméletére Kubó által kidolgozott [6] kvantummechanikai formalizmus vizsgálatát sem, amely — bár lényegesen nehezebben kezelhető apparátus — sokkal általánosabb érvényű, mint a Boltzmann-egyenletre alapozott elmélet.



## Köszönetnyilvánítás

Hálás köszönetemet szeretném kifejezni Nagy Elemér professzornak és Zawadowski Alfréd tudományos munkatársnak, akikkel sok értékes megbeszélést folytattam munkámmal kapcsolatban és akik a kézirat gondos átolvasása után értékes megjegyzéseikkel segítettek a végleges szöveg kialakításában.

## IRODALOM

- [1] P. Drude, Ann. Phys. 1, 566, 1900.
- [2] P. Wiedemann, H. Franz, Ann. Phys. 89, 497, 1853.
- [3] H. A. Lorentz, The Theory of Electrons, Teubner, 1909. Leipzig.
- [4] A. Sommerfeld, Z. Phys. 47, 1, 1928.  
A. Sommerfeld, N. H. Frank, Rev. Mod. Phys. 3, 1, 1931.
- [5] A. H. Wilson, The Theory of Metals, University Press, 1958. Cambridge.
- [6] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570, 1957.  
R. Kubo, M. Yokota, J. Phys. Soc. Japan 12, 1203, 1957.  
R. Kubo, Lectures in Theoretical Physics Vol. 1. 120, Interscience Publisher, 1959. London.
- [7] L. Boltzmann, Vorlesung über Gastheorie. J. A. Barth, 1923. Leipzig.
- [8] H. Grad, Handbuch der Physik Vol. XII. 205. Springer-Verlag, 1958. Berlin.  
N. N. Bogoliubov, Studies in Statistical Mechanics Vol. 1. 5, North-Holland Publishing Co. 1962. Amsterdam.  
M. Dresden, Studies in Statistical Mechanics Vol. 1. 303. North-Holland Publishing Co. 1962. Amsterdam.  
E. G. D. Cohen, Ergodic Theories 207, Academic Press, 1961. London.  
I. Prigogine, Non-Equilibrium Statistical Mechanics Interscience Publisher, 1962. London.  
E. G. D. Cohen, Fundamental Problems in Statistical Mechanics 110, North-Holland Publishing Co. 1962. Amsterdam.
- [9] L. Van Hove, Physica 21, 517, 1955.  
L. Van Hove, Physica 23, 441, 1957.  
L. Van Hove, Physica 25, 268, 1959.  
L. Van Hove, Ergodic Theories 155, Academic Press, 1961. London.  
L. Van Hove, Fundamental Problems in Statistical Mechanics 157, North-Holland Publishing Co. 1962. Amsterdam.
- [10] I. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. 97, 863, 1955.  
W. Kohn, Phys. Rev. 115, 1460, 1959.  
G. H. Wannier, Phys. Rev. 117, 432, 1960.  
D. R. Fredkin, G. H. Wannier, Phys. Rev. 125, 1910, 1962.  
E. I. Blount, Phys. Rev. 126, 1636, 1962.
- [11] W. Shockley, Félvezetők elektronfizikája, Műszaki Könyvkiadó, 1958. Budapest.
- [12] H. Jones, C. Zener, Proc. Roy. Soc. A144, 101, 1934.  
J. C. Slater, Rev. Mod. Phys. 6, 209, 1934.  
W. V. Houston, Phys. Rev. 57, 184, 1940.  
S. Raimes, The Wave Mechanics of Electrons in Metals, North-Holland Publishing Co. 1961. Amsterdam.
- [13] H. Jones, Handbuch der Physik Vol. XIX. 227, Springer-Verlag, 1956. Berlin.
- [14] M. Dresden, Rev. Mod. Phys. 33, 265, 1961.
- [15] L. I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw Hill Book Co. 1955. New York.
- [16] L. C. Slater, Phys. Rev. 76, 1592, 1949.
- [17] W. Brauer, H. Schulz, Phys. Stat. Sol. 4, K17, 1964.
- [18] G. H. Wannier, Elements of Solid State Theory, University Press, 1959. Cambridge.
- [19] Sz. G. Mihlin, Integrálegyenletek, Akadémiai Kiadó, 1953. Budapest.
- [20] L. Onsager, Phys. Rev. 37, 405, 1931.  
H. B. G. Casimir, Rev. Mod. Phys. 17, 343, 1945.  
S. R. de Groot, P. Mazur, Non-Equilibrium Thermodynamics, North-Holland Publishing Co. 1962. Amsterdam.
- [21] H. B. Callen, Phys. Rev. 73, 1349, 1948.



- [22] *W. Ehrenberg*, Electric Conduction in Semiconductors and Metals, Clarendon Press, 1958, Oxford.
- J. M. Ziman*, Electrons and Phonons, Clarendon Press, 1960. Oxford.
- [23] *F. J. Blatt*, Solid State Physics Vol. 4. 200. Academic Press Inc. 1957. New York.
- J. P. Jan*, Solid State Physics Vol. 5. 3. Academic Press Inc. 1957. New York.
- [24] *W. Schottky*, Festkörper Probleme Vol. 1. 316. Akademie-Verlag, 1962. Berlin.
- [25] *C. Herring*, Bell System Techn. J. 34, 237, 1955.
- C. Herring, E. Vogt*, Phys. Rev. 101, 944, 1956.
- [26] *M. Kohler*, Z. Phys. 124, 772, 1948.
- E. H. Sondheimer*, Proc. Roy. Soc. A203, 75, 1950.
- J. M. Ziman*, Can. J. Phys. 34, 1256, 1956.
- A. Seeger*, Can. J. Phys. 34, 1278, 1956.
- H. Nakano*, Proc. Phys. Soc. 82, 757, 1963.
- [27] *P. L. Taylor*, Proc. Roy. Soc. A275, 200, 1963.
- [28] *E. H. Sondheimer*, Proc. Roy. Soc. A268, 100, 1962.
- [29] *S. Zukotynski, J. Kolodziejczak*, Phys. Stat. Sol. 3, 990, 1963.
- [30] *W. Zawadzki*, Phys. Stat. Sol. 3, 1006, 1963.

### A. FÜGGELEK: NÉHÁNY KOMMUTÁTOR KISZÁMÍTÁSA

Ezen A. függelékben a sebesség és gyorsulás operátorainak meghatározásához szükséges kommutátorokat fogjuk kiszámítani. Mielőtt a konkrét számításokra rátérnénk, két összefüggésre hívjuk fel a figyelmet.

Legyen  $g(\vec{k})$  egy tetszés szerinti, de Taylor-sorával előállítható függvény, akkor

$$[g(-i\vec{\nabla}), \vec{r}] = -i \left( \frac{\partial g(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}}, \quad (\text{A.1})$$

amit könnyen beláthatunk, ha az egyik komponensre elvégezzük a számítást:

$$\begin{aligned} \left[ g \left( -i \frac{\partial}{\partial x} \right), x \right] &= \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} g^{(n)}(0) \cdot \left( -i \frac{\partial}{\partial x} \right)^n, x \right] = \\ &= -i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n!} g^{(n)}(0) \cdot \left( -i \frac{\partial}{\partial x} \right)^{n-1} = -i g^{(1)} \left( -i \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Legyenek  $A$ ,  $B$  és  $C$  operátorok, akkor

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \quad (\text{A.3})$$

amit könnyen verifikálhatunk, ha a jobb és bal oldalt részletesen kiírjuk. Egyszerűsödik az összefüggés, ha az operátorokról feltételezzük, hogy

$$A = B, \quad A^+ = A, \quad C^+ = \pm C, \quad (\text{A.4})$$

ekkor ugyanis

$$[A, C]^+ = (AC - CA)^+ = C^+ A^+ - A^+ C^+ = \mp [A, C] \quad (\text{A.5})$$

és az (A.3) összefüggés a következő módon írható

$$[A^2, C] = [A, C]A \mp \text{adjungált}. \quad (\text{A.6})$$

Írjuk még fel, hogy szem előtt legyen, a Hamilton-, sebesség- és gyorsulás-operátor alakját:

$$H = E(-i\vec{\nabla}) + \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A}\vec{\nabla} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + eU, \quad (\text{A.7})$$

$$\vec{v} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{r}], \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{a} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, \vec{v}]. \quad (\text{A.9})$$

A sebesség-operátor meghatározásához szükséges kommutátorok közül

$$[\vec{A}^2, \vec{r}] = [U, \vec{r}] = 0, \quad (\text{A.10})$$

mert kanonikusan konjugált változó párok nem szerepelnek. Az (A.1) összefüggés felhasználásával közvetlenül adódik, hogy

$$\frac{i}{\hbar} [E(-i\vec{\nabla}), \vec{r}] = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}}. \quad (\text{A.11})$$

Végül az (A.3) és (A.1) összefüggések felhasználásával belátható, hogy

$$-\frac{e}{mc} [\vec{A}\vec{\nabla}, \vec{r}] = -\frac{e}{mc} \overleftrightarrow{\vec{A}[\vec{\nabla}, \vec{r}]} = -\frac{e}{mc} \vec{A}, \quad (\text{A.12})$$

ahol a felső nyíl a skalárszorítás útján való összetartozásra utal.

A gyorsulás-operátor meghatározásához szükséges kommutátorok közül

$$\left[ E(-i\vec{\nabla}), \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}} \right] = [\vec{A}^2, \vec{A}] = [U, \vec{A}] = 0, \quad (\text{A.13})$$

mert nem tartalmaznak kanonikusan konjugált változó párokat. Felhasználva a vektorpotenciál (2.25) alakját és az (A.1) összefüggést

$$-\frac{ie}{\hbar mc} [E(-i\vec{\nabla}), \vec{A}] = -\frac{ie}{2\hbar mc} \vec{H} \times [E(-i\vec{\nabla}), \vec{r}] = -\frac{ie}{2\hbar mc} \vec{H} \times \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}}. \quad (\text{A.14})$$

A továbbiakban a (2.25), (A.1), (A.3) és (A.4) képletekre történő hivatkozást nem írjuk ki. A következő kommutátor így számítható:

$$\begin{aligned} & -\frac{e}{\hbar mc} \left[ \vec{A}\vec{\nabla}, \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}} \right] = \\ & = -\frac{e}{\hbar mc} \left[ \vec{A}, \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}} \right] \vec{\nabla} = \frac{e}{2\hbar mc} \left[ \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}}, \overleftrightarrow{\vec{H} \times \vec{r}} \right] \vec{\nabla} = \\ & = \frac{e}{2\hbar mc} \left[ \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}}, \vec{r} \right] (\vec{\nabla} \times \vec{H}) = \frac{e}{2\hbar^2 c} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}} \left( -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} \times \vec{H} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Ezt a kifejezést még tovább alakíthatjuk, ha felírjuk a sebességoperátort az előzőtől eltérő formában. Ezt a formát úgy kaphatjuk meg, hogy a perturbálatlan Hamilton-operátor helyébe nem vezetünk be egy effektív Hamilton-operátort, hanem eredeti alakjában hagyjuk, azaz

$$H_0 = E(-i\vec{\nabla}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}). \quad (\text{A.16})$$

Ekkor a sebesség-operátor

$$\vec{v} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{r}] = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} - \frac{e}{mc} \vec{A} \quad (\text{A.17})$$

és ebből a nabla-operátort az (A.15) kifejezésbe helyettesítve és figyelembe véve, hogy a gyorsulás-operátor minden tagja önadjungált, így az (A.15) alatt felírt kommutátor is ilyen, tehát a következő alakban írható:

$$-\frac{e}{\hbar mc} \left[ \vec{A}\vec{\nabla}, \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}} \right] = \frac{e}{4\hbar^2 c} \left\{ \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \right)_{\vec{k} = -i\vec{\nabla}} \left[ \left( \vec{v} + \frac{e}{mc} \vec{A} \right) \times \vec{H} \right] + \text{adj.} \right\}. \quad (\text{A.18})$$



Az (A.15)-höz hasonlóan számíthatjuk a következő kommutátort:

$$\begin{aligned} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 [\overline{A}\overline{\nabla}, \overline{A}] &= \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \overline{A}[\overline{\nabla}, \overline{A}] = \\ &= -\frac{1}{2} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \overline{A}[\overline{\nabla}, \overline{r}] \times \overline{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \overline{A} \times \overline{H}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

A következő kommutátor számítása:

$$\begin{aligned} \frac{ie^2}{2\hbar^2 mc^2} \left[ \overline{A}^2, \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}} \right] &= \frac{ie^2}{2\hbar^2 mc^2} \left\{ \left[ \overline{A}, \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}} \right] \overline{A} - \text{adj.} \right\} = \\ &= -\frac{ie^2}{4\hbar^2 mc^2} \left\{ \left[ \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}}, \overline{r} \right] (\overline{A} \times \overline{H}) - \text{adj.} \right\} = \\ &= -\frac{ie^2}{4\hbar^2 mc^2} \left\{ \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}} (\overline{A} \times \overline{H}) + \text{adjungált} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

És végül, ha figyelembe vesszük a skalárpotenciált a használt mértékben felírva, akkor (2.11) alapján:

$$\begin{aligned} \frac{ie}{\hbar^2} \left[ U, \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}} \right] &= \frac{ie}{\hbar^2} \left[ \left( \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}}, \overline{r} \right] \left( \overline{E}_h - \frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{H} \times \overline{r}_0) \right) = \\ &= \frac{e}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \right)_{\vec{k}=-i\vec{\nabla}} \left( \overline{E}_h - \frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{H} \times \overline{r}_0) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Az (A.13), (A.14), (A.18), (A.19), (A.20) és (A.21) összefüggések segítségével a gyorsulás-operátor már könnyen felírható.

## B. FÜGGELÉK: A GYORSULÁS-OPERÁTOR VÁRHATÓÉRTÉKE

A (2.28) alatt felírt gyorsulás-operátor várhatóértékét fogjuk meghatározni feltételezve, hogy az elektron állapotát leíró hullámfüggvény (2.2) alakú. Felhasználva a (2.24), (2.21) és (2.14) összefüggéseket, a kérdéses várhatóérték a következő alakban írható:

$$\begin{aligned} \langle \vec{a} \rangle &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\vec{k}} |c_{\vec{k}}|^2 \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \langle \overline{F}_L \rangle + \left\{ \sum_{\vec{k}} |c_{\vec{k}}|^2 \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \left[ \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} - \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \langle \vec{v} \rangle \right) \times \overline{H} \right] - \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} c_{\vec{k}}^* c_{\vec{k}'} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} [(\psi_{\vec{k}}, \overline{A} \psi_{\vec{k}'}) \times \overline{H}] + \text{adj.} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Fejtsük most sorba a  $\vec{k} = \vec{k}_0$  helyen a  $|c_{\vec{k}}|^2$  mellett lassan változó függvényeket és vezessük be a következő jelölést

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \Delta \vec{k}, \quad (\text{B.2})$$

ahol  $\vec{k}_0$  most szigorúan a (2.26) egyenlettel van definiálva, így  $\langle \Delta \vec{k} \rangle$  különbözhet zérustól, de fel-

tételezhetően nem nagyon, ezért a sorfejtést csak  $\Delta\bar{k}$ -ban első rendig végezzük. Legyen továbbá az effektív-tömeg-tenzor reciproka

$$\bar{M}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \bar{k}_0^2} \quad (\text{B.3})$$

és vegyük figyelembe, hogy az állapotfüggvény és a Bloch-függvények normáltsága miatt

$$\sum_{\bar{k}} |c_{\bar{k}}|^2 = 1, \quad (\text{B.4})$$

valamint a (2.26) összefüggést és akkor (B.1) a következő alakban írható:

$$\begin{aligned} \langle \bar{a} \rangle = & \bar{M}^{-1} \langle \bar{F}_L \rangle + \left( \frac{\partial \bar{M}^{-1}}{\partial \bar{k}_0} \langle \Delta \bar{k} \rangle \right) \langle \bar{F}_L \rangle + \frac{e\hbar}{4c} \bar{M}^{-1} [(\bar{M}^{-1} \langle \Delta \bar{k} \rangle) \times \bar{H}] - \\ & - \frac{e^2}{4mc^2} \left\{ \left\langle \left( \frac{\partial \bar{M}^{-1}}{\partial \bar{k}_0} \Delta \bar{k} \right) [\bar{A} \times \bar{H}] \right\rangle + \text{adj} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

A  $\Delta\bar{k}$ -val arányos tagok általában nem tűnnek el, hiszen — mint már említettük — a (2.26) összefüggés által definiált  $\bar{k}_0$  általában nem egyezik meg  $\langle \bar{k} \rangle$ -val, ezért ezeket a tagokat meg fogjuk becsülni. A  $\Delta\bar{k}$ -t tartalmazó tagokat összefoglalva a gyorsulásoперátor várhatóértéke

$$\langle \bar{a} \rangle = \bar{M}^{-1} \langle \bar{F}_L \rangle + 0(\Delta \bar{k}), \quad (\text{B.6})$$

ahol az elhanyagolásra kerülő tagot becslés céljából azon további egyszerűsítés mellett írjuk fel, hogy az effektív-tömeg-tenzor izotróp, azaz skalárszor az egységtenzor. Így

$$\begin{aligned} 0(\Delta \bar{k}) = & \left( \frac{\partial \bar{M}^{-1}}{\partial \bar{k}_0} \langle \Delta \bar{k} \rangle \right) \langle \bar{F}_L \rangle + \frac{e\hbar}{4c} (\bar{M}^{-1})^2 [\langle \Delta \bar{k} \rangle \times \bar{H}] - \\ & - \frac{e^2}{2mc^2} \text{Re} \left\{ \langle [\bar{A} \times \bar{H}] \circ \Delta \bar{k} \rangle \frac{\partial \bar{M}^{-1}}{\partial \bar{k}_0} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Itt a harmadik tag meghatározása céljából  $\langle \bar{k}_i (\bar{r} - \bar{r}_0)_j \rangle$  típusú szorzatok várhatóértékét kell kiszámítani. Ehhez segítségül használjuk fel a következő összefüggést

$$\iint e^{i(\bar{k}' - \bar{k})\bar{r}} \Phi(\bar{k}', \bar{r}) d^3 \bar{k}' d^3 \bar{r} = \frac{8\pi^3}{V} \int \Phi(\bar{k}, \bar{r}) d^3 \bar{r}, \quad (\text{B.8})$$

amelyet a Fourier-integrálok elmélete alapján könnyen be lehet bizonyítani, amint az Jones és Zener közleményében [12] megtalálható. Felhasználva ezt az összefüggést, állítsuk elő a következő összeget:

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{k}} c_{\bar{k}}' (\psi_{\bar{k}}, \bar{r}_j \psi_{\bar{k}}') &= -\frac{iV}{8\pi^3} \iint c_{\bar{k}}' \psi_{\bar{k}}^* \frac{\partial e^{i\bar{k}'\bar{r}}}{\partial \bar{k}_j'} u_{\bar{k}}'(\bar{r}) d^3 \bar{k}' d^3 \bar{r} = \\ &= -\frac{iV}{8\pi^3} \left\{ -\iint \frac{\partial c_{\bar{k}}'}{\partial \bar{k}_j'} \psi_{\bar{k}}^* \psi_{\bar{k}}' d^3 \bar{k}' d^3 \bar{r} - \iint c_{\bar{k}}' \psi_{\bar{k}}^* e^{i\bar{k}'\bar{r}} \frac{\partial u_{\bar{k}}'}{\partial \bar{k}_j'} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{r} = \right. \\ &= i \left\{ \frac{\partial c_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} + c_{\bar{k}} \int u_{\bar{k}}^* \frac{\partial u_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} d^3 \bar{r} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$



Ennek felhasználásával felírhatjuk a  $\langle \bar{k}_i \bar{r}_j \rangle$  és  $\langle \bar{k}_i \bar{r}_{0j} \rangle$  várható értékeket és rögtön figyelembe fogjuk venni, hogy a  $|c_k|^2$  függvény a  $\bar{k}_0$  helyen éles maximummal rendelkezik; így

$$\begin{aligned} \langle \bar{k}_i \bar{r}_j \rangle &= \sum_{k, k'} c_k^* c_{k'} \bar{k}_i (\psi_{\bar{k}}, \bar{r}_j \psi_{\bar{k}}') = \\ &= i \sum_{\bar{k}} c_k^* \bar{k}_i \left\{ \frac{\partial c_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} + c_{\bar{k}} \int u_{\bar{k}}^* \frac{\partial u_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} d^3 \bar{r} \right\} = i \sum_{\bar{k}} \bar{k}_i c_k^* \frac{\partial c_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} + i \langle \bar{k}_i \rangle \int u_{\bar{k}_0}^* \frac{\partial u_{\bar{k}_0}}{\partial \bar{k}_{0j}} d^3 \bar{r}, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

illetve

$$\begin{aligned} \langle \bar{k}_i \bar{r}_{0j} \rangle &= \langle \bar{k}_i \rangle \bar{r}_{0j} = \langle \bar{k}_i \rangle \sum_{k, k'} c_k^* c_{k'} (\psi_{\bar{k}}, \bar{r}_j \psi_{\bar{k}}') = \\ &= i \langle \bar{k}_i \rangle \sum_{\bar{k}} c_k^* \left\{ \frac{\partial c_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} + c_{\bar{k}} \int u_{\bar{k}}^* \frac{\partial u_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} d^3 \bar{r} \right\} = \\ &= i \langle \bar{k}_i \rangle \sum_{\bar{k}} c_k^* \frac{\partial c_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j} + i \langle \bar{k}_i \rangle \int u_{\bar{k}_0}^* \frac{\partial u_{\bar{k}_0}}{\partial \bar{k}_{0j}} d^3 \bar{r}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Bevezetve a

$$\Delta' \bar{k} = \bar{k} - \langle \bar{k} \rangle \quad (\text{B.12})$$

jelölést és kivonva a (B.10)-ből a (B.11) egyenletet

$$\langle \bar{k}_i (\bar{r} - \bar{r}_0)_j \rangle = i \sum_{\bar{k}} \Delta' \bar{k}_i c_k^* \frac{\partial c_{\bar{k}}}{\partial \bar{k}_j}. \quad (\text{B.13})$$

Abból a célból, hogy a jobb oldalon szereplő deriváltat megbecsüljük, helyettesítsük be a (2.1) időtől függő Schrödinger-egyenletbe a (2.2) alakú megoldást:

$$i\hbar \sum_{\bar{k}'} \dot{c}_{\bar{k}'} \psi_{\bar{k}'}' = \sum_{\bar{k}'} c_{\bar{k}'}' H \psi_{\bar{k}'}'. \quad (\text{B.14})$$

Ebből a szokásos módon, a Bloch-függvények ortonormált tulajdonságát kihasználva adódik, hogy

$$\dot{c}_{\bar{k}} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\bar{k}'} c_{\bar{k}'}' (\psi_{\bar{k}}, (H_0 + H_1) \psi_{\bar{k}'}'). \quad (\text{B.15})$$

Nagyságrendi becslésről lévén szó,  $H_1$ -t a  $H_0$  operátor mellett elhagyhatjuk és akkor

$$\dot{c}_{\bar{k}} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\bar{k}'} c_{\bar{k}'}' (\psi_{\bar{k}}, E(-i\nabla) \psi_{\bar{k}'}') = \frac{1}{i\hbar} c_k E(\bar{k}), \quad (\text{B.16})$$

ahol felhasználtuk a (2.14) összefüggést és a Bloch-függvények ortonormáltságát. A megoldás most már egyszerű integrálással

$$c_{\bar{k}} = e^{\frac{\alpha(\bar{k})}{\hbar} - \frac{i}{\hbar} E(\bar{k})t}, \quad (\text{B.17})$$

ahol  $\alpha(k)$  tetszés szerinti, de feltételezzük, hogy valós függvény, ami speciális esetekben biztosítható. A (B.7) kifejezés második tagjának meghatározása céljából a (B.13) várhatóérték reális részét kell kiszámítanunk. Ez pedig figyelembe véve a (B.16) összefüggést, továbbá azt, hogy a  $|c_{\bar{k}}|^2$  függvény a  $\bar{k} = \bar{k}_0$  helyen éles maximummal rendelkezik, valamint a (B.2) és (2.26) összefüggéseket

$$\text{Re} \langle \bar{k}_i (\bar{r} - \bar{r}_0)_j \rangle = - \langle \Delta \bar{k}_i \rangle \langle \bar{v}_j \rangle t. \quad (\text{B.18})$$

Ezt a kifejezést a (B.7) összefüggésbe helyettesítve és rendezve

$$0(\Delta \vec{k}) = \left( \frac{\partial M^{-1}}{\partial \vec{k}_0} \langle \Delta \vec{k} \rangle \right) \langle \vec{F}_L \rangle + \frac{e\hbar}{4c} (M^{-1})^2 [\langle \Delta \vec{k} \rangle \times \vec{H}] + \\ + \frac{e^2 t}{4mc^2} \{ [(\vec{H} \times \langle \vec{v} \rangle) \times \vec{H}] \circ \langle \Delta \vec{k} \rangle \} \frac{\partial M^{-1}}{\partial \vec{k}_0}. \quad (\text{B.19})$$

Vagy bevezetve az

$$\omega = \frac{e|\vec{H}|}{mc} \quad (\text{B.20})$$

Larmor-frekvenciát, a következő becslést írhatjuk fel

$$0(\Delta \vec{k}) \equiv \left( \frac{\partial M^{-1}}{\partial \vec{k}_0} \langle \Delta \vec{k} \rangle \right) \langle \vec{F}_L \rangle \left( 1 + \frac{\omega t}{4} \right) + \frac{e\hbar}{4c} (M^{-1})^2 [\langle \Delta \vec{k} \rangle \times \vec{H}]. \quad (\text{B.21})$$

Ebből már könnyen meghatározható, hogy a  $\Delta k$ -val arányos tag a (B.6) kifejezésben a főtag mellett milyen nagyságú járulékot eredményezhet.

### C. FÜGGELÉK: AZ INTEGRÁLEGYENLET ITERÁCIÓS MEGOLDÁSÁRÓL

A (3.29) alatti integrálegyenlet megoldását kézenfekvő lenne szukcesszív approximáció módszerével előállítani. Ez azonban sajnos nem lehetséges, mert — mint mindjárt megmutatjuk — a módszer alkalmazhatóságának feltételei esetünkben nincsenek kielégítve.

A Fredholm-típusú integrálegyenletek megoldásáról például *Mihlin* tankönyvében [19] van szó. Ennek alapján a (3.29) integrálegyenlet akkor oldható meg a szukcesszív approximáció módszerével, ha

$$\iint \left| \frac{V(\vec{k}, \vec{k}')}{V(\vec{k})} \right|^2 d^3 k d^3 \vec{k}' \leq 1. \quad (\text{C.1})$$

Látni fogjuk, hogy ez a feltétel nem teljesül.

Legyen  $g_1(\vec{k})$  és  $g_2(\vec{k})$  folytonos függvény, akkor a Bunyakovszkij—Schwarz-féle egyenlőtlenség a következő alakban írható [19]:

$$\left[ \int |g_1(\vec{k})| \cdot |g_2(\vec{k})| d^3 \vec{k} \right]^2 \leq \int |g_1(\vec{k})|^2 d^3 \vec{k} \cdot \int |g_2(\vec{k})|^2 d^3 \vec{k}. \quad (\text{C.2})$$

Ezt a felhasználva a következő átalakítást végezhetjük:

$$1 = \left[ \int \frac{V(\vec{k}, \vec{k}')}{V(\vec{k})} d^3 \vec{k}' \right]^2 \leq \int |V^2(\vec{k}, \vec{k})| d^3 \vec{k}' \cdot \int \frac{d^3 \vec{k}'}{|V^2(\vec{k})|} = \\ = \int \left| \frac{V(\vec{k}, \vec{k}')}{V(\vec{k})} \right|^2 d^3 \vec{k} \cdot \int d^3 \vec{k}''. \quad (\text{C.3})$$

És ezt a (C.1) egyenlőtlenség bal oldali kifejezésébe helyettesítve azt kapjuk, hogy

$$\iint \left| \frac{V(\vec{k}, \vec{k}')}{V(\vec{k})} \right|^2 d^3 \vec{k} d^3 \vec{k}' \geq 1, \quad (\text{C.4})$$

ami éppen ellentétben van a (C.1) feltétellel, tehát a szukcesszív approximáció módszere általában nem alkalmazható a (3.29) integrálegyenlet megoldására.



## D. FÜGGELEK: 1–3. LEMMÁK BIZONYÍTÁSA

1. Lemma. A (3.35) összefüggések közül a második bizonyítása céljából vezessük be a

$$g(\bar{k}, \bar{k}') = \gamma(-\bar{k}, -\bar{k}') \quad (\text{D.1})$$

függvényt. Most írjuk fel a (3.31) integrálegyenletet, de  $\bar{k}$  helyébe  $-\bar{k}$ -t és  $\bar{k}'$  helyébe  $-\bar{k}'$ -t írva, valamint felhasználva a (3.42) és (3.8) tulajdonságokat, ekkor

$$V(\bar{k})g(\bar{k}, \bar{k}') - \int V(-\bar{k}, \bar{l})\gamma(\bar{l}, -\bar{k}')d^3\bar{l} = \delta(\bar{k} - \bar{k}') - \frac{1}{\theta_B}. \quad (\text{D.2})$$

Az  $\bar{l}$  helyébe  $-\bar{l}$  új integrálási változót bevezetve megállapíthatjuk, hogy  $g(\bar{k}, \bar{k}')$  is kielégíti a (3.31) definiáló integrálegyenletet, tehát ha a határfeltételeket egyformán megkívánjuk, akkor ebből következik, hogy

$$\gamma(\bar{k}, \bar{k}') = g(\bar{k}, \bar{k}') = \gamma(-\bar{k}, -\bar{k}'). \quad (\text{D.3})$$

Ez a szimmetria tulajdonság a (3.37) összefüggés szerint lehetőséget ad  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  függvény (3.40) alakú, azaz mindkét változóban páros és páratlan részre történő felbontásra.

Bizonyítsuk most a (3.35) összefüggések közül az elsőt. Írjuk fel a (3.31) alatti integrálegyenletet különböző változókkal:

$$V(\bar{k})\gamma(\bar{k}, \bar{k}') - \int V(\bar{k}, \bar{l})\gamma(\bar{l}, \bar{k}')d^3\bar{l} = \delta(\bar{k} - \bar{k}') - \frac{1}{\theta_B}, \quad (\text{D.4})$$

$$V(\bar{k})\gamma(\bar{k}, \bar{k}'') - \int V(\bar{k}, \bar{l})\gamma(\bar{l}, \bar{k}'')d^3\bar{l} = \delta(\bar{k} - \bar{k}'') - \frac{1}{\theta_B}. \quad (\text{D.5})$$

Szorozzuk meg (D.4)-t  ${}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k}'')$ -vel, (D.5)-t  ${}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$ -vel, integráljunk  $\bar{k}$  szerint és vonjuk ki az elsőből a másodikat. Ha figyelembe vesszük, hogy a  $\bar{k}$ -ban páratlan függvény integrálja a Brillouin-zónára zérus, akkor

$$\begin{aligned} {}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k}'') - {}_0\gamma(\bar{k}'', \bar{k}') &= \iint {}_0V(\bar{k}, \bar{l}) {}_0\gamma(\bar{l}, \bar{k}'') {}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3\bar{k} d^3\bar{l} - \\ &- \iint {}_0V(\bar{k}, \bar{l}) {}_0\gamma(\bar{l}, \bar{k}') {}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}'') d^3\bar{k} d^3\bar{l}. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

A második integrálban a  $\bar{k}$  és  $\bar{l}$  integrálási változókat felcserélve, felhasználva a (3.7) szimmetria tulajdonságot, a jobboldal eltűnik és az állítást kaptuk.

2. Lemma. Kényelmi szempontból jelöljük most  $r$  gót betűvel azokat az indexeket, amelyek 1–9 között minden értéket felvehetnek. A (3.44) összefüggést teljes indukcióval bizonyítjuk.  $N=1$  esetére (3.24) szerint

$$\hat{A}_1^\alpha = 0 \quad (\text{D.7})$$

és ennek következtében (3.32) alapján

$$\hat{\Phi}_1^\alpha = 0. \quad (\text{D.8})$$

Tegyük most fel, hogy az állítás  $N-1$  esetére igaz, tehát

$$\hat{\Phi}_P^{\alpha_1, \nu_2, \dots, \nu_P} = 0 \quad P = 1, 2, \dots, N-1, \quad (\text{D.9})$$

de akkor természetesen (3.21) szerint

$$\hat{\Phi}_P^{\alpha_1, \nu_2, \dots, \nu_P} = 0 \quad (\text{D.10})$$

is igaz. Ezt felhasználva és ismét (3.24) alapján

$$\hat{A}_{P+1}^{\alpha_1, \nu_2, \dots, \nu_P, \nu_{P+1}} = 0 \quad (\text{D.11})$$

és ennek következtében (3.32) szerint

$$\hat{\Phi}_N^{\alpha_1, \nu_2, \dots, \nu_N} = \frac{1}{T_0} \int \int V(\bar{k}', \bar{k}'') (f_0' - f_0'').$$

$$\cdot \sum_{P=1}^{N-1} \hat{\Phi}_P^{\alpha_1, \nu_2, \dots, \nu_P}(\bar{k}') \hat{\Phi}_{N-P}^{\nu_{P+1}, \dots, \nu_N}(\bar{k}'') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}''. \quad (\text{D.12})$$

Itt viszont az összegezésben szereplő tagok első tényezője (D.9) miatt tűnik el és így végeredményben igazoltuk az állítást.

3. *Lemma.* Mielőtt a bizonyításhoz hozzáfekszünk, vezessük be az  $x$  szám vagy  $x(\bar{k})$  függvény paritásának fogalmát és jelöljük ezt  $P(x)$ -nek, amely két értéket vehet fel:

$$P(x) = \begin{cases} e, & \text{ha } x \text{ páros szám, vagy } x(\bar{k}) \text{ } \bar{k} \text{ páros függvénye,} \\ o, & \text{ha } x \text{ páratlan szám, vagy } x(\bar{k}) \text{ } \bar{k} \text{ páratlan függvénye.} \end{cases}$$

(Az  $e$  és  $o$  jelek az even és odd angol szavakra utalnak.) Nyilván érvényesek a következő szorzási szabályok:

$$\begin{aligned} e \cdot e &= e, \\ e \cdot o &= o, \\ o \cdot o &= e, \end{aligned}$$

$$P(x_1 + x_2) \text{ ha } x_1 \text{ és } x_2 \text{ szám,}$$

$$P(x_1) \cdot P(x_2) =$$

$$P(x_1 \cdot x_2) \text{ ha } x_1 \text{ és } x_2 \text{ } \bar{k}\text{-nak függvénye.}$$

A (3.45) alatt felírt lemmát ezekkel a jelölésekkel így fogalmazhatjuk meg:

$$P(\hat{\Phi}_N^{l_1, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots, l_m, \dots}) = P(m). \quad (\text{D.13})$$

Bizonyítást teljes indukcióval végezzük.  $N=1$  esetére

$$P(\hat{\Phi}_1^l) = P\left(\int_0 \hat{A}_1^l(\bar{k}') \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'\right) = P\left(\int_0 \hat{A}_1^l(\bar{k}') {}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'\right) = o = P(1), \quad (\text{D.14})$$

ahol a bal alsó indexek a függvények paritására utalnak és megjegyezzük azt, hogy két-változás függvény esetén mindkét változóra érvényesek. Felhasználtuk továbbá a (3.40) felbontást és azt a tényt, hogy páratlan függvény integrálja a Brillouin-zónára eltűnik a szóban forgó függvények periodicitása miatt. Tegyük most fel, hogy állításunk  $(N-1)$ -re igaz és  $N$ -re is igazoljuk.

$$P(\hat{\Phi}_N^{l_1, \dots, \alpha_j, \dots, l_j, \dots, \nu}) = P\left(\int \left\{ \hat{A}_N^{l_1, \dots, \nu}(\bar{k}') + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{1}{T_0} \int V(\bar{k}', \bar{k}'') (ef_0' - ef_0'') \sum_{P=1}^{N-1} \hat{\Phi}_P^{l_1, \dots}(\bar{k}') \hat{\Phi}_{N-P}^{\nu}(\bar{k}'') d^3 \bar{k}'' \right\} \gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}', \quad (\text{D.15})$$

ahol lényegében a (3.32) alatti mátrix egy elemének paritását írtuk fel. Most felhasználva a (3.40) és (3.41) felbontásokat és a már többször alkalmazott integrálási szabályt a páratlan függvényekre vonatkozóan, könnyen meg lehet mutatni, hogy (D.15) így írható

$$P(\hat{\Phi}_N^{l_1, \dots, \alpha_j, \dots, l_j, \dots, \nu}) = P(\hat{A}_N^{l_1, \dots, \nu}) + P(\hat{\Phi}_P^{l_1, \dots}) P(\hat{\Phi}_{N-P}^{\nu}). \quad (\text{D.16})$$

Vizsgáljuk külön-külön a tagokat és ne tévesszük szem elől, hogy a felső indexcsoport  $m$  darab  $l$ -típusú indexet tartalmaz. Tekintettel (3.24)-re

$$P(\hat{A}_N^{l_1, \dots, \alpha_j, \dots, l_j, \dots, \nu}) = \begin{cases} o \cdot P(\hat{\Phi}_{N-1}^{\alpha_j, \dots, l_j, \dots}) = o \cdot P(m-1) & \text{ha } \nu = l_m \\ P(\hat{\Phi}_{N-1}^{l_1, \dots, \alpha_j, \dots, l_j, \dots}) = P(m) & \text{ha } \nu = \alpha_{N-m} \end{cases} = P(m). \quad (\text{D.17})$$



A második tag paritásának meghatározása céljából tegyük fel, hogy az  $N$  darab felső index közül az első  $P$  számú  $m_1$  darab  $l$ -típusú indexet tartalmaz, míg a további  $N-P$  számú  $m_2$  darabot. Természetesen  $m_1 + m_2 = m$ . Ekkor

$$P(\hat{\Phi}_P^{l_1}, \dots) \cdot P(\hat{\Phi}_{N-P}^{v_1}, \dots) = P(m_1)P(m_2) = P(m). \quad (D.18)$$

A (D.17) és (D.18) összefüggéseket (D.16)-ba helyettesítve a lemmát bebizonyítottuk.

#### E. FÜGGELÉK: A 4. LEMMA BIZONYÍTÁSA

Elegendő belátni az (5.17) alatti sorral meghatározott  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  helyett csupán a sor tagjairól hogy

$$G_N(\bar{k}, \bar{k}') = G_N(-\bar{k}, -\bar{k}') \quad \text{és} \quad {}_0G_N(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') = {}_0G_N(-\bar{H}; \bar{k}', \bar{k}). \quad (E.1)$$

Az (5.15), (5.10) és (5.8) összefüggéseket felhasználva

$$\begin{aligned} G_N(-\bar{k}, -\bar{k}') &= \left( -\frac{8\pi^3 e T_0}{V \hbar^2 c} \right)^{N-1} \iint \dots \int \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \frac{\partial f_0^{(N-1)}}{\partial E^{(N-1)}} \cdot \\ &\cdot \gamma(-\bar{k}, \bar{k}^{(N-1)}) \bar{H} \bar{\omega}^{(N-1)} \gamma(\bar{k}^{(N-1)}, \bar{k}^{(N-2)}) \dots \\ &\dots \bar{H} \bar{\omega}^{(2)} \gamma(\bar{k}^{(2)}, \bar{k}^{(1)}) \bar{H} \bar{\omega}^{(1)} \gamma(\bar{k}^{(1)}, -\bar{k}') d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N-1)}. \end{aligned} \quad (E.2)$$

Vezessünk be új integrálási változókat a  $\bar{k}^{(m)} \rightarrow -\bar{k}^{(m)}$  előírás alapján, majd alkalmazzuk a (3.35) szimmetria tulajdonságok közül a másodikat és vegyük figyelembe, hogy az  $\bar{\omega}$  operátor a (3.26) definíció szerint, az  $f_0$  függvényhez hasonlóan, a  $\bar{k}$  változónak páros függvénye. Ekkor az (E.2) egyenlet így alakul:

$$\begin{aligned} G_N(-\bar{k}, \bar{k}') &= \left( -\frac{8\pi^3 e T_0}{V \hbar^2 c} \right)^{N-1} \iint \dots \int \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \frac{\partial f_0^{(N-1)}}{\partial E^{(N-1)}} \gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(N-1)}) \cdot \\ &\cdot \bar{H} \bar{\omega}^{(N-1)} \gamma(\bar{k}^{(N-1)}, \bar{k}^{(N-2)}) \dots \bar{H} \bar{\omega}^{(1)} \gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k}') d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N-1)} = G_N(\bar{k}, \bar{k}'), \end{aligned} \quad (E.3)$$

mint azt a 4. lemma első felében állítottuk.

A  $G(\bar{k}, \bar{k}')$  függvény (E.3) alatti szimmetria tulajdonsága (3.37) szerint biztosítja, hogy felbontható mindkét változójában egyszerre páros és páratlan függvények összegére, azaz

$$G(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') = {}_eG(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') + {}_oG(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}'). \quad (E.4)$$

A felbontás tagjait konkrét integrálokkal felírhatjuk, ha figyelembe vesszük, hogy az  $\bar{\Omega}$  operátor a paritás viszonyokat nem változtatja meg, hiszen például egy  ${}_oG(\bar{k}, \bar{k}')$  függvény esetén az (5.10) definiáló összefüggés szerint:

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} {}_oG(\bar{k}, \bar{k}') &= -\frac{8\pi^3 T_0}{V \hbar^2 c} \int \frac{\partial f_0''}{\partial E''} \gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \bar{\omega}'' {}_oG(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' = \\ &= -\frac{8\pi^3 T_0}{V \hbar^2 c} \int \frac{\partial f_0''}{\partial E''} {}_o\gamma(\bar{k}, \bar{k}'') \bar{\omega}'' {}_oG(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' \end{aligned} \quad (E.5)$$

hiszen  $\bar{\omega}$  és  $f_0$  páros függvény, így az integrálhoz  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}')$ -nek csak a páratlan része ad járulékot, tehát végeredményben ismét mindkét változóban páratlan függvényt kaptunk. Ezek szerint

$$\begin{aligned} {}_oG_N(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') &= \left( -\frac{8\pi^3 e T_0}{V \hbar^2 c} \right)^{N-1} \iint \dots \int \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \frac{\partial f_0^{(N-1)}}{\partial E^{(N-1)}} {}_o\gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(N-1)}) \cdot \\ &\cdot \bar{H} \bar{\omega}^{(N-1)} {}_o\gamma(\bar{k}^{(N-1)}, \bar{k}^{(N-2)}) \dots \bar{H} \bar{\omega}^{(1)} {}_o\gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k}') d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N-1)}. \end{aligned} \quad (E.6)$$

Alkalmazzuk az (5.12) integrál átalakítást  $(N-1)$ -szer egymás után és vegyük figyelembe a (3.35) szimmetria tulajdonságot

$${}_0G_N(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') = \left( -\frac{8\pi^3 eT_0}{V\hbar^2 c} \right)^{N-1} \iint \dots \int \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \frac{\partial f_0^{(N-1)}}{\partial E^{(N-1)}} {}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k}^{(1)}) \cdot \\ \cdot [-\bar{H}\bar{\omega}^{(1)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k}^{(2)})] \dots [-\bar{H}\bar{\omega}^{(N-1)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(N-1)}, \bar{k})] d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N-1)}. \quad (\text{E.7})$$

Ha most felcseréljük az integrálási változókat a  $\bar{k}^{(m)} \rightarrow \bar{k}^{(N-m)}$  előírás szerint, akkor

$${}_0G_N(\bar{H}; \bar{k}, \bar{k}') = \left( -\frac{8\pi^3 eT_0}{V\hbar^2 c} \right)^{N-1} \iint \dots \int \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \frac{\partial f_0^{(N-1)}}{\partial E^{(N-1)}} {}_0\gamma(\bar{k}', \bar{k}^{(N-1)}) \cdot \\ \cdot [-\bar{H}\bar{\omega}^{(N-1)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(N-1)}, \bar{k}^{(N-2)})] \dots [-\bar{H}\bar{\omega}^{(1)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k})] d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N-1)} = \\ = {}_0G_N(-\bar{H}; \bar{k}', \bar{k}), \quad (\text{E.8})$$

amit bizonyítani akartunk.

#### F. FÜGGELÉK: A $C_{N+2}$ MÁTRIXOK SZIMMETRIÁJA

Kiindulásként írjuk fel újból az (5.24) alatt adott mátrixelemet

$$\hat{C}_{i,j_1,\dots,j_N,i} = \frac{2kT}{V} \left( -\frac{8\pi^3 ekT}{V\hbar^2 c} \right)^N \iint \dots \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \\ \dots \frac{\partial f_0^{(N)}}{\partial E^{(N)}} \tilde{V}_i \tilde{V}'_i \gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(1)}) \bar{\omega}_{j_N}^{(1)} \gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k}^{(2)}) \bar{\omega}_{j_{N-1}}^{(2)} \gamma(\bar{k}^{(2)}, \bar{k}^{(3)}) \dots \\ \dots \bar{\omega}_{j_1}^{(N)} \gamma(\bar{k}^{(N)}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N)}. \quad (\text{F.1})$$

Mivel  $\tilde{V}$  a  $\bar{k}$  változónak páratlan függvénye a  $\gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(1)})$ -ből csak az  ${}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(1)})$  ad járulékot a  $\bar{k}$  szerinti integrálás során és hasonló kijelentést tehetünk a  $\bar{k}^{(1)}, \dots, \bar{k}^{(N)}, \bar{k}'$  szerinti integrálások során is lépésről lépésre. Végeredményben az integrálhoz a Green-függvény (3.40) szerinti felbontásából csak a páratlan rész ad járulékot, ami alkalmat ad a (3.35) szimmetria tulajdonság alkalmazására. Most — az előző függelékhez hasonlóan — az (5.12) integrál átalakítást  $N$ -szer egymásután alkalmazzuk, majd felcseréljük az integrálási változókat a  $\bar{k}^{(m)} \rightarrow \bar{k}^{(N+1-m)}$ , illetve  $\bar{k} \leftrightarrow \bar{k}'$  utasítás szerint

$$\hat{C}_{i,j_1,\dots,j_N,i} = (-1)^N \frac{2kT}{V} \left( -\frac{8\pi^3 ekT}{V\hbar^2 c} \right)^N \iint \dots \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial f'_0}{\partial E'} \frac{\partial f_0^{(1)}}{\partial E^{(1)}} \dots \\ \dots \frac{\partial f_0^{(N)}}{\partial E^{(N)}} \tilde{V}_i \tilde{V}'_i {}_0\gamma(\bar{k}, \bar{k}^{(1)}) \bar{\omega}_{j_1}^{(1)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(1)}, \bar{k}^{(2)}) \bar{\omega}_{j_2}^{(2)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(2)}, \bar{k}^{(3)}) \dots \\ \dots \bar{\omega}_{j_N}^{(N)} {}_0\gamma(\bar{k}^{(N)}, \bar{k}') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}' d^3 \bar{k}^{(1)} \dots d^3 \bar{k}^{(N)} = \hat{C}_{i,j_N,\dots,j_1,i}, \quad (\text{F.2})$$

amint azt az (5.24) egyenlőség állította.



## G. FÜGGELÉK: AZ 5. LEMMA BIZONYÍTÁSA

Mindenekelőtt megmutatjuk, hogy a (6.6) és (6.10) ortogonalitási relációk egyenértékűek.

a) Tegyük fel, hogy a (6.10) reláció teljesül. Szorozzuk meg a (3.34) integrálegyenletet  $\tilde{V}' \partial f_0 / \partial E'$ -vel és integráljuk  $\bar{k}'$  szerint, akkor

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})} d^3 \bar{k}' &= \frac{1}{\theta_B} \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' d^3 \bar{k}' + \\ &+ \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' \Gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}' - \int \frac{V(\bar{k}, \bar{k}'')}{V(\bar{k}'')} \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' \Gamma(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' d^3 \bar{k}' \end{aligned} \quad (G.1)$$

és itt a jobb oldal a  $\tilde{V}$  sebesség páratlan voltának, illetve a feltevés következtében eltűnik, tehát a (6.10) relációból a (6.6) ortogonalitási reláció is következik. Bizonyítsuk most a tételt fordítva!

b) Tegyük fel, hogy a (6.6) reláció teljesül. Elegendő a (6.10) ortogonalitási relációt  ${}_0\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')$ -re belátni, hiszen  ${}_0\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')$ -re automatikusan teljesül, mert  $\tilde{V}$  a  $\bar{k}$ -nak páratlan,  $f_0$  pedig páros függvénye. Szorozzuk meg a (3.34) integrálegyenletet  $V(\bar{k}')/V(\bar{k})$ -val

$$\frac{V(\bar{k}')}{V(\bar{k})} {}_0\Gamma(\bar{k}, \bar{k}') - \frac{V(\bar{k}')}{V(\bar{k})} \int \frac{{}_0V(\bar{k}, \bar{k}'')}{V(\bar{k}'')} {}_0\Gamma(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' = \frac{{}_0V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})} - \frac{1}{\theta_B} \frac{V(\bar{k}')}{V(\bar{k})} \quad (G.2)$$

és alkalmazzuk a (3.43) szimmetria tulajdonságot

$${}_0\Gamma(\bar{k}', \bar{k}) - \frac{1}{V(\bar{k})} {}_0V(\bar{k}, \bar{k}'') {}_0\Gamma(\bar{k}', \bar{k}'') d^3 \bar{k}'' = \frac{{}_0V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})} - \frac{1}{\theta_B} \frac{V(\bar{k}')}{V(\bar{k})}, \quad (G.3)$$

majd cseréljük meg a  $\bar{k}$  és  $\bar{k}'$  változókat, használjuk fel a (3.7) szimmetria relációt, és rendezzük az egyenletet:

$${}_0\Gamma(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{{}_0V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} + \int \frac{{}_0V(\bar{k}'', \bar{k}')}{V(\bar{k}')} {}_0\Gamma(\bar{k}, \bar{k}'') d^3 \bar{k}'' - \frac{1}{\theta_B} \frac{V(\bar{k})}{V(\bar{k}')} \quad (G.4)$$

Ha most megszorozzuk az egyenletet  $\tilde{V}' \partial f_0 / \partial E'$ -vel és integrálunk  $\bar{k}'$  szerint, akkor a jobb oldal a feltevés, illetve  $V(\bar{k}')$  páros és  $\tilde{V}'$  páratlan voltának következtében eltűnik, tehát a (6.6) és (6.10) ortogonalitási relációk egyenértékűségét teljes egészében bebizonyítottuk.

A (6.11) és (6.10) ortogonalitási relációk egyenértékűsége a (3.43) szimmetria tulajdonságot figyelembe véve közvetlenül látható.

Végül rátérünk az 5. lemma állításának bizonyítására. Írjuk fel a (6.2) definíciós egyenletet a Green-függvény (3.33) felbontását alkalmazva

$$\tilde{\epsilon} \tilde{V} = -\frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{1}{V(\bar{k})} - \frac{8\pi^3 T_0}{V} \frac{1}{V(\bar{k})} \int \frac{\partial f_0'}{\partial E'} \tilde{V}' \Gamma(\bar{k}, \bar{k}') d^3 \bar{k}'. \quad (G.5)$$

A jobb oldal második tagja a (6.10) ortogonalitási reláció következtében eltűnik, ez azonban a (6.6) relációval egyenértékű, így valóban a lemma állítását kaptuk.

Megjegyezzük még, hogy ez a skalár relaxációs időt biztosító elégséges feltétel egyben szükséges feltétel is, ha megköveteljük, hogy a kérdéses skalár  $\tau$  a (6.7) kifejezéssel legyen egyenlő.

## H. FÜGGELÉK: VARIÁCIÓS ELV

Meg fogjuk mutatni, hogy a Boltzmann-egyenlet megoldásához szükséges Green-függvény-nyel közvetlen kapcsolatban álló  $\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')$  meghatározása variációs elv alapján történhet. Vezessünk be új változót

$$A(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{\Gamma(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k})} \quad (\text{H.1})$$

és akkor a (3.34) integrálegyenlet helyett a következőt írhatjuk:

$$V(\bar{k}) A(\bar{k}, \bar{k}') - \int V(\bar{k}, \bar{k}'') A(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'' = \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} - \frac{1}{\theta_B}. \quad (\text{H.2})$$

Vezessük be a  $P$  operátort az alábbi definícióval:

$$PX(\bar{k}, \bar{k}') = V(\bar{k}) X(\bar{k}, \bar{k}') - \int V(\bar{k}, \bar{k}'') X(\bar{k}'', \bar{k}') d^3 \bar{k}'', \quad (\text{H.3})$$

ahol  $X(\bar{k}, \bar{k}')$  tetszés szerinti függvény. Most természetesen az előbbi (H.2) egyenlet egyszerűbben írható

$$PA(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} - \frac{1}{\theta_B} \quad (\text{H.4})$$

alakban és ezt az egyenletet kell végeredményben megoldani.

Mielőtt a variációs elvet kimondanánk, a  $P$  operátor egy nevezetes tulajdonságát bizonyítjuk be. Vezessük be a belső szorzat fogalmát a

$$\int X_1(\bar{k}) X_2(\bar{k}) d^3 \bar{k} = \langle X_1, X_2 \rangle \quad (\text{H.5})$$

definícióval és akkor azt állítjuk, hogy

$$\langle X_1, PX_2 \rangle = \langle X_2, PX_1 \rangle. \quad (\text{H.6})$$

A bizonyítás rendkívül egyszerű, hiszen a (H.3) definíciót alkalmazva

$$\begin{aligned} \langle X_1, PX_2 \rangle &= \int X_1 V(\bar{k}) X_2 d^3 \bar{k} - \iint X_1 V(\bar{k}, \bar{k}'') X_2'' d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}'' = \\ &= \int X_2 V(\bar{k}) X_1 d^3 \bar{k} - \iint X_2 V(\bar{k}, \bar{k}'') X_1'' d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}'' = \langle X_2, PX_1 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{H.7})$$

ahol  $X''$  az  $X(\bar{k}'', \bar{k}')$ , vagy  $X(\bar{k}'')$  függvényt jelenti attól függően, hogy egy-, vagy kétváltozós függvény az  $X$ , továbbá felcseréltük az integrálási változókat és alkalmaztuk  $V(\bar{k}, \bar{k}')$ -re a (3.7) szimmetria tulajdonságot. Most a (H.7) egyenlet jobb oldalait összeadva és felhasználva  $V(k)$  (3.30) definícióját

$$\langle X_1, PX_2 \rangle = \frac{1}{2} \iint (X_1 - X_1'') V(\bar{k}, \bar{k}'') (X_2 - X_2'') d^3 \bar{k} d^3 \bar{k}'' \quad (\text{H.8})$$

összefüggést vezethetjük le. Ebből a felírásból közvetlenül következik, hogy

$$\langle X, PX \rangle \equiv 0 \quad (\text{H.9})$$

hiszen a  $V(\bar{k}, \bar{k}')$  átmeneti valószínűség pozitív definit.

Ezek után a variációs elvet a következő formában fogalmazhatjuk meg: Legyen  $A(\bar{k}, \bar{k}')$  a (H.4) integrálegyenlet megoldása és  $Y(\bar{k}, \bar{k}')$  egy tetszőleges, de olyan függvény, amely kielégíti a

$$\langle Y, PY \rangle = \left\langle Y, \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} - \frac{1}{\theta_B} \right\rangle \quad (\text{H.10})$$



összefüggést. Ekkor  $A(\bar{k}, \bar{k}')$  az  $Y(\bar{k}, \bar{k}')$  függvények közül az, amellyel a  $\langle Y, PY \rangle$  belső szorzat maximális értékű. Bizonyítás a (H.9), (H.7), (4.4) és (H.10) összefüggéseket felhasználva:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle (A - Y), P(A - Y) \rangle = \\ &= \langle A, PA \rangle + \langle Y, PY \rangle - 2\langle Y, PA \rangle = \\ &= \langle A, PA \rangle + \langle Y, PY \rangle - 2 \left\langle Y, \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} - \frac{1}{\theta_B} \right\rangle = \\ &= \langle A, PA \rangle - \langle Y, PY \rangle, \end{aligned} \quad (\text{H.11})$$

amiből most már következik a variációs elv állítása, azaz

$$\langle A, PA \rangle \equiv \langle Y, PY \rangle. \quad (\text{H.12})$$

A variációs elv kézenfekvően felhasználható közelítő megoldások előállítására, pontosabban bizonyos meghatározott típusú közelítő megoldások közül a legjobb megoldás kiválasztására. Legyenek például a közelítő megoldásaink olyan függvények, amelyek csak néhány paraméter különböző értékeiben térnek el egymástól. Ekkor a variációs elv alapján a paraméterek legmegfelelőbb értékeit szélsőértékszámítással meg lehet határozni. Az így kapott „legjobb” közelítés természetesen még nagyon különbözhet a valódi megoldástól, ha a közelítő megoldásokat képező függvényeket nagyon rosszul választottuk. Így például egy lehetséges eljárás a következő; megpróbáljuk a  $A(\bar{k}, \bar{k}')$  függvényt a következő sor alakjában előállítani

$$Y(\bar{k}, \bar{k}') = \sum_i \lambda_i(\bar{k}') A_i(\bar{k}), \quad (\text{H.13})$$

ahol a tagok száma lehet véges, vagy esetleg végtelen. A  $A_i(\bar{k})$  függvények ismertek és valamilyen fizikai megfontolás alapján határoztuk meg azokat, a  $\lambda_i(\bar{k}')$  függvények az ismeretlenek és a variációs elv alapján szeretnénk ezeket úgy meghatározni, hogy (H.13) a legjobban közelítse a valódi megoldást. A (H.10) mellékfeltétel figyelembevételével az

$$R = \sum_{i,j} P_{ij} \lambda_i \lambda_j + \beta \left\{ \sum_{i,j} P_{ij} \lambda_i \lambda_j - \sum_i \lambda_i V_i \right\} \quad (\text{H.14})$$

függvénynek kell a maximumát keresni  $\lambda_i(\bar{k}')$  variálása mellett. Itt  $\beta$  egy Lagrange-multiplikátor és szerepelnek még a következő jelölések

$$P_{ij} = \int A_i(\bar{k}) P A_j(\bar{k}) d^3 \bar{k}, \quad (\text{H.15})$$

$$V_i = \int A_i(\bar{k}) \left\{ \frac{V(\bar{k}, \bar{k}')}{V(\bar{k}')} - \frac{1}{\theta_B} \right\} d^3 \bar{k}. \quad (\text{H.16})$$

A (H.14) függvény szélsőértékét tetszőleges  $\delta \lambda_i$  variáció esetén a következő

$$2(\beta + 1) \sum_j P_{ij} \lambda_j - \beta V_i = 0 \quad (\text{H.17})$$

egyenletből lehet meghatározni. Ez azonban a (H.10) mellékfeltételnek nem mondhat ellent, így ha  $\lambda_i$ -vel szorzunk és  $i$ -szerint összegezzük, a Lagrange-multiplikátorra következik, hogy  $\beta = -2$ , tehát a  $\lambda_i$ -ket meghatározó egyenlet

$$\sum_j P_{ij} \lambda_j(\bar{k}') = V_i(\bar{k}'), \quad (\text{H.18})$$

ahol, a  $\lambda_i$ -k és  $V_i$ -k  $\bar{k}'$ -nek függvényei és  $P_{ij}$ -k számok. Ha a  $A_i(\bar{k})$  próba-függvényeket elég ügyesen választottuk, akkor (H.18) alapján a Boltzmann-egyenlet megoldásához szükséges Green-függvényt jó közelítésben elő tudjuk állítani, ha ismerjük a  $V(\bar{k}, \bar{k}')$  átmeneti valószínűséget.

Az általunk közölt variációs elv formailag talán csak annyiban különbözik a transzport elméletben ismeretes variációs elvektől, hogy két-vektor-változós függvény meghatározására használjuk, aminek következtében például a (H.13) sorfejtés együtthatói nem számok, hanem függvények. A tartalmi különbség azonban lényeges; míg az eddigi variációs elvek a Boltzmann-egyenlet elsőrendű közelítésben érvényes megoldására vonatkoznak, illetve újabb elvek bevezetésével a mágneses tér hatását is figyelembe lehetett venni, addig a most bemutatott variációs elv a Green-függvény meghatározására vonatkozik és független attól, hogy a Boltzmann-egyenletet milyen közelítésben akarjuk megoldani, hiszen a Green-függvény ismeretében elvben tetszés szerinti rendig elmehetünk. Ez a tartalom kifejeződik abban a formában is, hogy mind a megoldandó integrálegyenlet magja, mind a (H.10) mellékfeltétel csak a  $V(k, k')$  átmeneti valószínűséget tartalmazza.



# A KLASZIKUS IRODALOMBÓL

## A KIZÁRÁSI ELV, A LORENTZ-CSOPORT, ÉS A TÉRIDŐ S A TÖLTÉS TÜKRÖZÉSE\*

W. PAULI

### AJÁNLÁS

Niels Bohr 70-edik születésnapja felidézi bennem annak a hosszú és még ma is folytatódó közös zarándokútnak az emlékét, amely az 1922. év óta oly sok állomáson vezetett keresztül. A teljesség igénye nélkül itt csak néhányat említek meg ezek közül, amennyiben azok összefüggnek a dolgozat tárgyával; remélem, engedelmet nyerek, hogy munkámat születésnapjának ünneplése alkalmából neki ajánljam.

Egy szellemi és emberi tekintetben zavarbaejtő rövid időszak után, melyet a szemléletesség („Anschaulichkeit”) átmeneti korlátozása okozott, általános egyetértés alakult ki azt követően, hogy a konkrét képeket absztrakt matematikai szimbólumokkal, mint pl. a pszi-vel helyettesítették. Speciálisan a forgáshoz tapadó konkrét kép helyét a háromdimenziós forgáscsoport ábrázolásainak matematikai jellemzői foglalták el. Ez a csoport *Dirac* kutatásainak eredményeképpen csakhamar a Lorentz-csoporttá bővült. Szerencsére *Dirac* a fizikai valóság iránt mutatott kifinomult érzékével nem riadt vissza attól, hogy elinduljon az úton, melyről még nem tudta, hová vezet; így jutott elméletéhez, mely az elektromos töltés előjelét illetően pontos szimmetriát mutat, melyben az energia mindenkor pozitív s amely megjósolja a párok keletkezését és elnyelődését. Ezt a célt *Dirac* úgy érte el, hogy elgondolásait új és meglepő módon kapcsolta össze a kizárási elvvel.

A matematikai csoport a tér és az idő tükrözéseinek figyelembevételével tovább bővült. Már az elmélet meglehetősen korai szakaszában *Wigner* érdekes következtetéseket vont le az időtükrözéssel kapcsolatban azon látszólag triviális megjegyzés alapján, hogy valamely függvény helyettesítése annak komplex-konjugáltjával *per definitionem* nem „lineáris operátor”. Később *Schwinger* alternatív megfogalmazást adott megmutatva, hogy többet látunk, ha mindkét irányban olvasunk: nemcsak balról jobbra, hanem jobbról balra is; itt megkísérlem szerényen alkalmazni ezt a felismerést.

Úgy vélem, ez a dolgozat illusztrálja azt a tényt is, hogy a szigorú matematikai formalizmus és az ismeretelméleti elemzés egyaránt nélkülözhetetlen a fizikában, komplementer módon, a szó Niels Bohr-féle értelmében. Míg az előbbit megkísérlem arra felhasználni, hogy a plusz- és mínusz-jelek gazdag „bősége” segítségével

\* Niels Bohr and the Development of Physics, Pergamon Press, London, 1955. p. 30. és Нильс Бор и развитие физики, ИЛ, Москва, 1956.



az elmélet valamennyi említett vonatkozását fokozott „világosságra” törekedve egymással összekapcsoljam, az utóbbi azt tudatosítja bennem, hogy a tárggyal kapcsolatos végső „igazság” továbbra is a „mélységben lakozik”.<sup>1</sup>

## 1. § Bevezetés

Noha a spin (feles vagy egész) és a statisztika (antiszimmetrikus vagy szimmetrikus hullámfüggvények, a térkvantálásban: antikommütátorok vagy kommutátorok használata a termennyiségekre) kapcsolata a múltban több dolgozatban tárgyaltam (lásd [1–5]), még mindig van rá ok, hogy visszatérjek e régi megfontolásokhoz és javításokat eszközöljek rajtuk. Egyik ilyen ok az, hogy a régi dolgozatokban a megfontolások lényegében a szabad részecskék esetére korlátozódtak. Napjainkban a különféle részecskék vagy terek kölcsönhatásainak vizsgálata sokkal inkább áll az általános érdeklődés középpontjában s ez részben megváltoztatja a régi érvek súlyát. Pl. abból a célból, hogy elméletileg kizárjam az egész spinű terek antikommütátorok segítségével történő kvantálásának lehetőségét, bevezettem egy külön követelményt, mely szerint a fizikai mennyiségek kommutátorainak térszerű távolsággal elválasztott pontokban el kell tűnniök. Ezt azért tettem, hogy megszabaduljak annak lehetőségétől, hogy a tér kommutátora erőmentes esetben a  $\Delta$  függvény helyett a  $\Delta^{(1)}$  függvénnyel legyen egyenlő. Ez az anomális kvantálás azonban, ha tekintetbe vesszük a részecskék tetszőleges lokális kölcsönhatását egymással (azaz: a téregyenletek nemlinearitását) vagy más részecskékkel, nem terjeszthető ki a téregyenletekkel összeférő szabállyá. Ebben az általánosabb esetben eszerint a szóban forgó külön követelmény feleslegesnek látszik.

Ami a feles spin esetét illeti, Dirac eredeti érve, mely őt lyukelméletére vezette, hogy ti. az energiaértékeknek pozitívaknak kell lenniök, látszik számomra ma is a legjobb *a priori* elméleti érveknek, hogy a kizárási elv érvényességét ezen spinértékekre megindokoljuk. Igaz, hogy még a spinorterek antikommütátorokkal elvégzett kvantálása is csak szabad részecskékre biztosítja az energia pozitív előjelét (a vákuum energiájához mint zérusponthoz viszonyítva). Ha tekintetbe vesszük a kölcsönhatásokat, a végtelenségek elkerülésére külön szabályok alapján különleges eljárást kell alkalmaznunk: el kell végeznünk a tömeg és a töltés állandóinak renormálását. Bár ily módon sikerült elérni bizonyos előrehaladást, bizonyos, hogy e módszer eredményessége korlátozott, és alkalmazhatósága csak bizonyos kölcsönhatásokra terjed ki. Minthogy ez a módszer lényegében azon feltevésen alapszik, hogy a szabad (kölcsönhatásmentes) részecskék elmélete az ún. egyrészecske-állapotokra igaztalt érvényes,<sup>2</sup> Dirac régi érve, melyet lyukelméletében alkalmazott, legalábbis az állapotok ezen fajtájára továbbra is érvényben marad.

Egy másik okot szolgáltat a kérdés újból való megtárgyalására az a tény, hogy legutóbb próbálkozások történtek kapcsolat megállapítására egyrészről a tereknek tér- és időtükrözéskor, valamint a töltés tükrözésekor, pontosabban: részecske-

<sup>1</sup> Itt Schiller soraira utalok, melyeket Bohr annyira kedvelt:

„Nur die Fülle führt zur Klarheit

Und im Abgrund wohnt die Wahrheit.”

<sup>2</sup> G. Källén megadta a renormálás módszerének egy megfogalmazását a perturbációs módszerekre való hivatkozás nélkül [6]. Lee munkájában egy érdekes nemrelativisztikus példa tárgyalása található [7].



antirészecske-konjugációkor<sup>3</sup> mutatott viselkedése, másrésről a spin-statisztika között. Minthogy pl. az  $1/2$  spinű részecskék töltéssűrűsége a  $c$ -szám-elméletében pozitív definit, az a gondolat kínálkozott, hogy a terek ezen fajtájának antikommütátoros kvantálását (kizárási elv) a töltésszimmetria követelményéből származtassák le. Egyetlen spinortérre ez valóban igen könnyű volt, több  $1/2$  spinű tér esetében azonban bonyolultabb a helyzet, ha nem feltételezünk a töltéskonjugáció számára egy meghatározott fajtájú transzformációt, csupán valamely alkalmas transzformáció létezését feltételezzük, a pozitív energia posztulátumának felhasználása nélkül (lásd [4]). Ebben a dolgozatban ezért *feltételezzük* a részecske-antirészecske-konjugáció (AK) számára a normális transzformációt, mely minden spinorteret önmaga komplex konjugáltjával köt össze több spinortér esetében is. Ekkor formálisan ahhoz, hogy töltésszimmetriát kapjunk, szükséges, hogy a tér kvantálását antikommütátorok segítségével végezzük el, és a  $c$ -szám-elméletről a  $q$ -szám-elméletre áttérve minden, a térváltozókban bilineáris kifejezést antiszimmetrizáljunk, mint azt elsőként *Heisenberg* megmutatta [8].

Tovább követve e gondolatmenet fonalát *Schwinger* [9] ért el előrehaladást, ki egyszerű általános kifejezést adott meg a különböző fajtájú terek transzformációjára azon esetben, amelyben amellet, hogy az összes részecske a megfelelő antirészecskebe megy át (ez a transzformáció tehát magában foglalja a töltéskonjugációt), a téridő-koordináták is jelet váltanak. A következőkben ezt *erős tükrözésnek* fogom nevezni; rövidítése ST (*Schwinger-tükrözés*). A *Schwinger* által megadott transzformációnak lényeges része, hogy a tényezők sorrendjét valamennyi operátor kifejezésében ellentettre kell változtatnunk, más szavakkal: a képleteket nem balról jobbra, hanem jobbról balra kell olvasnunk. Az ST e részének megjelölésére a következőkben röviden az „inverzió” szót fogom használni. Azon transzformációs szabály, amelyet *Schwinger* az ST-re megadott, csak akkor érvényes, ha a feles spinű tereket antikommütátorokkal, az egész spinű tereket kommutátorokkal kvantáljuk.<sup>4</sup>

Az ST-t az AK-val kombinálva egy újabb transzformációt nyerünk, melynek eredményeképpen a téridő tükrözést szenved, de az elektromos töltés megőrzi előjelét, s a részecskék nem mennek át antirészecskébe. Ezt *gyenge tükrözésnek* nevezem. A gyenge tükrözést, melynek rövid jele WT lesz, *Wigner* már a nemrelativisztikus kvantummechanikában megfogalmazta [10], s azután általánosították azt a relativisztikus esetre (lásd pl. [11]). Könnyen látható (lásd *Watanabe* [12]), hogy a WT érvényessége független a tér felcserélési szabályaitól, így belőle, ellentétben ST vagy AK esetével, a statisztikára vonatkozóan semmilyen következtetés nem vonható le.

E dolgozat 2. §-ában megadom a WT és ST képleteit a legegyszerűbb esetekre, a 0,  $1/2$  és 1-es spinű terekre, anélkül, hogy ezzel bármi újat akarnék mondani.<sup>5</sup>

<sup>3</sup> Rövidítése a következőkben: AK.

<sup>4</sup> *Schwinger* dolgozatát olvasva könnyen támadhat bennünk az a téves benyomás, hogy minden transzformáció, mely a téridő-koordináták előjelét ellentettre változtatja, szükségképpen ellentettre változtatja az elektromos töltés előjelét is. Nyilvánvaló, hogy ez nem így van. A dolgozatot figyelmesen elolvastva azt találjuk azonban, hogy annak alapján nem következtethetünk bizonyossággal *Schwinger*nek ezen kérdésről vallott nézeteire.

<sup>5</sup> Meglepetésemre *Dr. G. Lüders* közölte velem, hogy a (21a) egyenlet nem található meg a publikált irodalomban. Ugyanakkor kisebb javításokat volt szíves javasolni, melyeket a szövegben figyelembe vettem. Időközben megjelent egy dolgozat (*H. Umezawa, S. Kamefuchi és S. Tanaka*, Progs. Theor. Phys. 12, 383, 1954), mely tárgyalja ezt a példát és más hasonló példákat is.



A WT-re vonatkozó képleteket a princetoni kutatócsoporttól kissé eltérő alakban adom meg; a két megfogalmazás azonban teljesen egyenértékű. Ebben a dolgozatban azonban valamennyi koordináta együttes tükrözésének tárgyalására szorítkozom; a tér és az idő tükrözésével külön nem foglalkozom. Ennek az az előnye, hogy nem kell feltételeznem a kölcsönhatási energia invarianciáját külön a tér vagy az idő tükrözésével szemben.

Első pillantásra úgy látszik, kényünk-kedvünk szerint kiindulhatunk az ST, AK vagy WT transzformációk bármelyikéből, *minthogy e három közül mindegyik szorzata a másik kettőnek*. Amint azonban azt Lüders egy Koppenhágában írott dolgozatban [13] felismerte, WT és AK a Hamilton-operátorokra mindketten ugyanazon járulékos megszorításokat szolgáltatják,<sup>6</sup> s arra a fontos következtetésre jutott, hogy az ST általánosabb követelményekből következik, mint a másik két transzformáció (WT és AK) bármelyike. Lüders bizonyítását azonban nem könnyű megérteni, minthogy benne felesleges feltevések kerülnek felhasználásra.

Ezen dolgozat fő célja: megadni ST érvényességének bizonyítását általánosabb előfeltevések mellett, kombinálva egy a szerzőtől korábban megadott transzformációt [2] az „inverzió” Schwinger-féle technikájával (3. §). Itt nem kíséreljük meg levezetni a spin és a statisztika kapcsolatát egyedül az ST létezéséből, hanem *feltesszük*, hogy ez a kapcsolat fennáll (A). Ami a speciális relativitást illeti, csupán a Lagrange-függvénynek a valódi Lorentz-transzformációkkal (a folytonos Lorentz-csoporttal; rövid jele  $L_4$ ) szemben mutatott invarianciáját feltételezzük (B). Feltételezzük továbbá az egyszerűség kedvéért a téregyenlet *lokális* jellegét, ami azt jelenti, hogy valamennyi térmennyiség véges rendű spinor vagy tenzor, és hogy a Lagrange-függvény (vagy a Hamilton-operátor) kölcsönhatási része ezen térmennyiségeknek csak véges rendű deriváltjait tartalmazza (C). (Ezen feltevések lehetséges általánosításait röviden vázoljuk a 3. § végén.) Célszerű feltenni,<sup>7</sup> hogy a „kinematikailag független spinorterek antikommutálnak” (D). Lehetséges volna megengedni azt is, hogy a spinorok bizonyos csoportjai egymással kommutáljanak, azonban matematikai szempontból mesterkéltnek látszik, hogy megtiltsuk lineáris kombinációik felléptét. Abból a célból, hogy (A) és (B) feltevéseinket alkalmazzuk, célszerű a térmennyiségeket olyan részekre felbontani, amelyek a valódi Lorentz-transzformációk alkalmazásakor (a feltevés szerint véges rendű) *irreducibilis* ábrázolások szerint transzformálódnak. Ezek mindegyikét egy  $\left(\frac{m}{2}, \frac{n}{2}\right)$  indexpárral szokás

jellemezni, ahol  $m, n$  egész számok. Ha a szóban forgó mennyiséget a két indexcsoport mindegyikében szimmetrikus spinorként írjuk, a pontozatlan és a pontozott indexek száma  $m$ , ill.  $n$ . Ha  $m+n$  páratlan (páros), úgy azt mondjuk, hogy a szóban forgó tér fermion- (bozon-) tér.

Felhasználva ezt a definíciót, most definiálhatjuk a „szorzatok rendezését”, a következőképpen:<sup>8</sup>

„Minden  $M$  számú bozon-térből és  $N$  számú fermion-térből képezett szorzatot a tényezők összes permutációjának  $(M+N)!$ -sal osztott összegével kell helyettesítenünk, ahol az egyes tagokat a fermion-terek páros permutációi esetében

<sup>6</sup> Ennek kimutatása egy bozontér és egy Dirac-tér csatolására ([14], [15], [16]), valamint négy Dirac-tér Fermi-csatolására történt meg ([17], [18]). Vö. alább 2. §.

<sup>7</sup> Vö. Lüders [13]; Ia posztulátum.

<sup>8</sup> Vö. Lüders [13]; IIa posztulátum, melyet itt kissé általánosítottunk.



+1-gyel, páratlan permutációi esetében -1-gyel kell még megszoroznunk.” Itt implicite felhasználtuk az (A) feltevést, mely azt mondja ki, hogy fermion-terekre csak az antikommutátorok, bozon-terekre pedig csak a kommutátorok egyenlők  $c$ -számokkal.

A legfőbb különbség a mi előfeltevéseink és Lüderséi között az, hogy mi nem használjuk fel a feltevést, hogy az elmélet invariáns külön a tér- vagy az időtükrözéssel szemben, sem pedig azt, hogy a Hamilton-operátor hermitikus.<sup>9</sup> Nyilvánvalóbbá tettük továbbá a gondolatmenet függetlenségét a mértékcsoporttól. Ez az általánosítás természetesen azt jelenti, hogy a töltés-integrál létezése nem szükségeszerű. Mindazonáltal levezethető egy általánosított ST, melynek alkalmazásakor minden rendezett lokális vektor (hasonlóan a téridő-koordináták négyesvektorához) jelet vált, és minden rendezett másodrendű tenzor vagy skalár változatlan marad.

A bizonyításhoz a [2]-ben megadott transzformációt használom fel, kihasználva az összes spinor és tenzor négy osztályra való felosztását, megfelelően annak, hogy a fent bevezetett  $m$  és  $n$  számok értéke páros-e vagy páratlan. A szóban forgó transzformáció a következőképpen fogalmazható meg: ST alkalmazásakor a tereket

$$\left. \begin{array}{ll} \text{páratlan } m+n \text{ (fermionok) esetén } (-i)(-1)^m = i(-1)^n\text{-nel} \\ \text{páros } m+n \text{ (bozonok) esetén } (-1)^m = (-1)^n\text{-nel} \end{array} \right\} \quad (T)$$

kell megszoroznunk. Vektorokra ( $m=n=1$ ) ez jelváltást jelent, ez vonatkozik a téridő-koordinátákra is.

A tétel, melyet a 3. §-ban bizonyítani fogunk, a következő:<sup>10</sup> *Ha (T) érvényes az eredeti térmennyiségekre és a téridő-koordinátákra, ugyancsak érvényes azok összes rendezett szorzatára vagy véges rendű deriváltjaikra, miután alkalmaztuk az inverziót.*

Könnyű megmutatni, hogy minden egyenlet, mely a valódi Lorentz-transzformációkkal szemben kovariáns, (T) alkalmazása után is érvényes marad, mint-hogy invariáns operációk a spinorok valamely szorzatára nem változtatják meg  $m$  vagy  $n$  páros vagy páratlan jellegét.

A (T) transzformáció konzisztenciáját illetően döntő fontosságú, hogy a (T) első sorában alkalmazott  $i$  tényező jelenléte folytán (T) minden invariáns realitási feltételt érintetlenül hagy.

Ez a  $q$ -szám-elméletre jellemző; a  $c$ -szám-elméletben ezzel szemben a spinorokra vonatkozó realitási feltételek a téridő tükrözéseikor nem maradnak változatlanok.<sup>11</sup>

Figyelemre méltó, hogy a  $q$ -szám-elméletben az ST mint „ajándék” jelenik meg, hacsak feltételezzük a folytonos  $L_4$ -et (a mértékcsoport nélkül) és a spin-statisztika kapcsolatot, anélkül, hogy a Lagrange-függvényekre további megszorításokat kellene kirónunk.<sup>12</sup>

<sup>9</sup> Az állapotvektorok két duális terének sajátos típusú kapcsolata a komplex-konjugálton keresztül szükségesű, de más fizikai okok folytán, mint az ST létezése. Vö. *Schwinger* transzponált operátoraival [9], 925. old.

<sup>10</sup> Vö. még: *Schwinger* [9], 8. lábjegyzet, 925. old.

<sup>11</sup> Ez a körülmény szorosan összefügg a spinorterek Bose-statisztika szerint, „negatív valószínűségek” segítségével történő kvantálásának Feynman-féle formális módszerével (lásd [5]).

<sup>12</sup> Nincs határozott véleményem arról, hogy vajon *Schwinger* előtt ismert volt-e már ezen eredmény általánossága vagy sem.

## 2. § (a) A gyenge tükrözés (WT)

A következőkben Lorentz-invariáns kvantált térelméleteket vizsgálunk, beleértve a különböző terek kölcsönhatásait, melyekre egyszerű példákat tárgyalunk majd. Mindenkor fel fogjuk itt tenni, hogy a feles spinű terek antikommutátorokkal (kizárási elv), az egész spinű terek pedig kommutátorokkal (Bose-statisztika) vannak kvantálva, anélkül, hogy ezt más posztulátumokból levezetnénk. A képzetes negyedik koordinátát használjuk:  $x_4 = it$ . A görög indexek 1-től 4-ig futnak, s a szokásos egységeket használjuk:  $\hbar = c = 1$ . A spinorindexeket nem írjuk ki, azonban a spinoroknak a skalároktól való megkülönböztetése céljából az előbbieket  $\psi$ -vel jelöljük — ha több spinorterünk van, azokat indexekkel különböztetjük meg egymástól —, az utóbbiakat pedig  $q$ -vel vagy  $\Phi$ -vel. Az elektromágneses négyespotenciált  $q_\mu$ -vel, az ennek rotációjaként nyerhető térerősségeket  $f_{\mu\nu} = -f_{\nu\mu}$ -vel jelöljük.

Ebben a dolgozatban a téridő koordinátákat mindenkor együtt tükrözzük:

$$x'_\nu = -x_\nu, \quad (1)$$

a tér és az idő tükrözéseit külön nem tárgyaljuk. Ennek oka a 3. §-ban nyilvánvalóbbá válik majd. Következésképpen a „pseudo” jelzőt itt nem fogjuk használni; azt fenntartjuk a tértükrözésekre. Az olyan mennyiségeket, amelyek a tükrözések itt vizsgált mindhárom faja (WT, AK és ST) esetében ugyanolyan módon transzformálódnak, általában ugyanazon betűvel jelöljük;  $q_\mu$  pl. vektormezon-teret is jelenthet, mely ezen három tükrözéssel szemben az elektromágneses térhez hasonló viselkedést mutat. Ezen kívül a skalár- és vektorterek másik fajtáját is bevezetjük majd, melyek jele  $\Phi$  és  $\Phi_\mu$  lesz, s amelyek a WT és AK tükrözések alkalmazásakor  $q$ -tól és  $q_\mu$ -tól eltérően transzformálódnak.

Most megkezdjük a gyenge tükrözés tárgyalását, mely a definíció szerint az elektromos töltés

$$Q = \int (-ij_4(x)) d^3x \quad (2)$$

operátorát változatlanul hagyja:

$$Q' = Q. \quad (3)$$

Minthogy itt a terek *lokális* transzformációira szorítkozunk, amelyek csak ugyanazon téridő-ponthoz terek között létesítenek kapcsolatot, a (3) összefüggést általánosítva megköveteljük

$$j'_\mu(x) = j_\mu(-x) \quad (4)$$

fennállását. Maxwell egyenleteiből és (4)-ből a térerősségekre következik:

$$f'_{\mu\nu}(x) = -f_{\mu\nu}(-x) \quad (5)$$

s (eltekintve egy esetleges további mértéktranszformációtól) a potenciálokra is:

$$q'_\mu(x) = q_\mu(-x). \quad (6)$$

A töltés elektromágneses fogalmát itt általánosítjuk annak érdekében, hogy különbséget tehessünk részecske és antirészecske között a neutronok és a neutrínók esetében is. A  $Q$  operátor ekkor általánosabb jelentéssel rendelkezik: a részecskék és antirészecskék számának különbségét jelenti, s egy általánosított mértékcsoport



folyamánnyaképpen a téregyenletnek integrálja. Ez a csoport a komplex (nem-hermitikus) terek két fajtáját különbözteti meg, melyek közül a csillagosak az  $e^{iz}$ , a csillagtalanok pedig az  $e^{-iz}$  fázistényezővel szorozódnak mértéktranszformációkor. E két fajta térnek  $Q$ -val képezett kommutátoraiban ennek megfelelően ellentett előjelek szerepelnek.

$$[Q, f] = -f, \quad [Q, f^*] = +f^*. \quad (7)$$

Itt az  $f$ -ek nincsenek közelebbről meghatározva: lehetnek spinorok, skalárok vagy vektorok stb., melyek az antirészecskéiktől megkülönböztethető részecskéket írnak le. Ha az  $f$  tér az egyik osztályba tartozik, az  $f^*$  hermitikus-konjugált tér a másik osztályba tartozik.

A mértékcsoporttól függetlenül létezik az energia-impulzus négyesvektor  $P_\mu$  operátora (melynek negyedik komponense az  $i$ -vel szorzott energia), mely a téridő  $x'_\mu = x_\mu + a_\mu$  eltolásainak csoportjával áll kapcsolatban s amely kielégíti az

$$i[P_\mu, f] = -\frac{\partial f}{\partial x_\mu} \quad (8)$$

felcserélési összefüggést valamennyi  $f$  térváltozó mellett.

A téridő (1) tükrözéseikor ezen egyenlet jobb oldala a baloldalon álló  $f$  tényezőhöz képest megváltoztatja előjelét, bármi legyen is  $f$  transzformációs törvénye. A  $P_\mu$  operátor előjelét azonban nem lehet megváltoztatni, minthogy az energia előjelének (a vákuumot zéruspontnak választva) fizikai okokból pozitívnak kell maradnia. Ezen túlmenően a skalár- és vektorterek esetében az energiát pozitív definit kvadratikussá alak állítja elő, mely formálisan sem válthat soha előjelet. Megköveteljük tehát a

$$P'_\mu = P_\mu \quad (9)$$

invariancia fennállását, melyet az általunk használt lokális transzformációk mellett általánosítva az energia-impulzus-sűrűség és a Lagrange-sűrűség invarianciájának követelményére jutunk:

$$T'_{\mu\nu}(x) = T_{\mu\nu}(-x), \quad L'(x) = L(-x), \quad (9a)$$

az itt vizsgált tükrözések valamennyi fajtája mellett.

Annak érdekében, hogy a kívánt jelváltást megkapjuk (8) bal oldalán, szükséges, hogy megengedjük nemlineáris operációk alkalmazását a rendszer állapotvektorára. Wigner ebből a célból az állapotvektor és valamennyi operátor komplex-konjugáltjára való áttérést választotta (a komplex-konjugált a hermitikus-konjugálttól megkülönböztetendő). Schwinger választása az inverzióra esett, melyet az a szabály definiál, hogy minden operátor-összefüggést jobbról balra kell olvasnunk, s nem pedig balról jobbra. Ez a két eljárás *ekvivalens*, minthogy valamennyi megfigyelhető fizikai mennyiséget hermitikus operátorok írnak le. Pusztán formális okokból itt Schwinger szabályát követjük, hogy ily módon elkerüljük annak szükségességét, hogy a hermitikus-konjugált mellé a komplex-konjugáltat is bevezessük (az előbbi az, amelyet itt csillaggal jelölünk), továbbá mert itt nem foglalkozunk az állapotvektorok explicit tárgyalásával, hanem a téroperátorok tárgyalására szorítkozunk (Heisenberg-kép). Bevezetjük tehát a következő szabályt:

*Az inverzió (valamennyi tényező sorrendjének ellentettre való változtatása) a terek transzformációjának lényeges részét kell hogy képezze, ha az időt tükrözzük, azaz mind WT, mind ST esetében.*

Figyelmünket most a  $Q$  operátor (7) felcserélési szabályára fordítva, WT esetét, melyben  $Q$  *per definitionem* megőrzi előjelét [lásd (3)], meg kell különböztetnünk ST esetétől, mikor is  $Q$  előjele ellentettre változik. Tekintetbe véve, hogy inverziókor a kommutátorok (7)-ben már előidéznak egy előjelváltást, a következő következtetésre jutunk:

*A WT esetében minden  $f$ -nek egy  $f^*$ -ba kell átmennie és megfordítva, ugyanakkor ST alkalmazásakor minden  $f$ -nek valamely  $f$ -be (s minden  $f^*$ -nak valamely  $f^*$ -ba) kell átmennie.*

Részletesebben, a WT esetében, melyet először tárgyalunk, komplex skalártér (töltött skalármező) transzformációs képletét a

$$\varphi'(x) = \varphi^*(-x), \quad \varphi^{*'}(x) = \varphi(-x), \quad (10)$$

a  $\psi(x)$  spinortér s az adjungált

$$\bar{\psi}(x) = \psi^*(x)\gamma_4 \quad (11)$$

tér transzformációs képletét a

$$\psi'(x) = \Omega^{-1}\bar{\psi}(-x), \quad \bar{\psi}'(x) = \psi(-x)\Omega \quad (12)$$

alakban kell felvennünk. Az utóbbi egyenletekben szereplő  $\Omega$  mátrix a  $\gamma_\mu$  hermitikus Dirac-mátrixokat, melyek a

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \quad (13)$$

feltételnek tesznek eleget, a  $(\gamma_\mu)^T$  transzponált mátrixokba transzformálja a

$$(\gamma_\mu)^T = \Omega\gamma_\mu\Omega^{-1} \quad (14)$$

képletnek megfelelően. Az unitér  $\Omega$  mátrix az

$$\Omega\Omega^* = 1, \quad \Omega^T = -\Omega \quad (15)$$

feltételnek tesz eleget.<sup>13</sup>

Ne feledjük, hogy az itt jelzett transzformáció mellett egy további, konstans fázisú mértéktranszformáció [mely jelenthet pl. egy jelváltást (10)-ben] még szabadon elvégezhető. Ez akkor válik fontossá, olyan kölcsönhatásokat vizsgálunk, melyek a szóban forgó részecskék keltésére és elnyelésére vezetnek, s ha több független teret veszünk szemügyre. Könnyen ellenőrizhetjük, hogy ez a transzformáció s az azt követően elvégzett inverzió a skalárookra érvényes Klein—Gordon-egyenlet s a spinorokra vonatkozó Dirac-egyenlet alakját érintetlenül hagyja. Az (5) képlet felhasználásával ellenőrizhetjük továbbá, hogy ez külső elektromágneses tér jelenlétében is igaz. A

$$j_\mu(x) = ie \left( \frac{\partial \varphi^*}{\partial x_\mu} \varphi - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} \right) \quad (16)$$

<sup>13</sup> Lásd [1], ahol  $\Omega$  jele  $B$  volt.



és

$$j_\mu(x) = ie\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\psi(x) \quad (17)$$

áramvektorok invarianciája [lásd (4)] az inverzió elvégzése mellett teljesül. Az utóbbi a  $\psi(-x)(\gamma_\mu)^T\bar{\psi}(-x)$  kifejezést pl.  $\bar{\psi}(-x)\gamma_\mu\psi(-x)$ -be viszi át.

Ezenkívül az energia-impulzus-sűrűség és a Lagrange-sűrűség invarianciája [lásd (9) és (9a)] is teljesül ezen 0 és 1/2 spinű részecskékre külső elektromágnes térben.

A teret síkhullámokra bontva megmutatható, hogy a (10) vagy a (12) transzformáció úgy értelmezhető mint minden keltő operátornak ugyanazon sajátrezgés elnyelő operátorával való helyettesítése, *anélkül*, hogy a részecskéket az antirészecskékkal felcserélnénk.

A WT itt megadott alakja nyilvánvalóvá teszi, hogy a *terekre vonatkozó felcserélési szabályok itt nem játszanak szerepet*. Ennek általános oka az, hogy egy  $f$ -nek valamely  $f^*$ -gal való helyettesítése egy szorzatot, mely mondjuk az  $f^*g$  alakú, először a  $gf^*$  alakra hoz, míg az ezt követő inverzió helyreállítja az eredeti  $f^*g$  sorrendet, úgyhogy végeredményben a tényezők sorrendje érintetlen marad. *Ennél fogva a WT ezen transzformációja attól függetlenül érvényes, feltételezzük-e az 1/2 spin és a kizárási elv, valamint a 0 spin és a Bose-statisztika normális kapcsolatát vagy sem* (lásd [12]).

További példák megtárgyalásához hasznos, ha megadjuk itt az áramé mellett a  $\psi$  spinorból és annak  $\bar{\psi}$  adjungáltjából a

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \quad (18)$$

és

$$\gamma_{[\mu\nu]} = \frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) \quad (19)$$

mátrixok segítségével képezhető többi kovariáns bilineáris alak transzformációját is. Ezt a

$$\left. \begin{aligned} (\gamma_5)^T &= \Omega\gamma_5\Omega^{-1}, & \gamma_{[\mu\nu]}^T &= -\Omega\gamma_{[\mu\nu]}\Omega^{-1} \\ [\gamma_5\gamma_\mu]^T &= -\Omega\gamma_5\gamma_\mu\Omega^{-1}, & [\gamma_5\gamma_{[\mu\nu]}]^T &= -\Omega\gamma_5\gamma_{[\mu\nu]}\Omega^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (14a)$$

egyenletekben fellépő előjelek határozzák meg. Ily módon (az  $x$  argumentum  $-x$ -szel való helyettesítése mellett) a WT esetében kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\psi}\psi, & \quad i\bar{\psi}\gamma_\mu\psi, & i\bar{\psi}\gamma_5\psi & \quad \text{esetében} + \text{jel}, \\ i\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi, & i\bar{\psi}\gamma_{[\mu\nu]}\psi, & \bar{\psi}\gamma_5\gamma_{[\mu\nu]}\psi & \quad \text{esetében} - \text{jel}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Az  $i$  tényezőket itt oly módon osztottuk ki, hogy (11) figyelembevételével mellett az adott kifejezések hermitikusak legyenek.

Most példaként egy bozon-tér és egy Dirac-féle spinor-tér kölcsönhatását tárgyaljuk. Először feltesszük, hogy az előbbi valós (hermitikus) tér, mely semleges — skaláris vagy vektoriális — részecskéknak felel meg. A valódi Lorentz-transzformációkkal szemben mutatott invariancia követelménye a kölcsönhatás Lag-

range-sűrűségére a következő lehetőségeket szolgáltatja:

$$\left. \begin{aligned} & \Phi \bar{\psi} \psi; \quad \Phi (i \bar{\psi} \gamma_5 \psi); \\ & \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi} \gamma_\mu \psi) + h. k.; \quad \varphi_\mu (i \bar{\psi} \gamma_\mu \psi); \\ & \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi) + h. k.; \quad \Phi_\mu (i \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi); \\ & \left( \frac{\partial \varphi_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \varphi_\mu}{\partial x_\nu} \right) i \bar{\psi} \gamma_{[\mu\nu]} \psi + h. k.; \\ & \left( \frac{\partial \varphi_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \varphi_\mu}{\partial x_\nu} \right) (\bar{\psi} \gamma_5 \gamma_{[\mu\nu]} \psi). \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Itt „+ h. k.” azt jelenti, hogy a szóban forgó kifejezéshez annak hermitikus-konjugáltját még hozzá kell adni; erre a deriváltak jelenléte folytán van szükség.

A WT esetében a bozon-térnek oly módon kell transzformálódnia, hogy a (21) Lagrange-sűrűség invariáns maradjon [lásd (9a)]. Ily módon azt találjuk, hogy a nagybetűkkel írott tereket a kisbetűkkel írott terektől eltérően kell transzformálnunk, nevezetesen

$$\varphi'(x) = -\varphi(-x), \quad \varphi'_\mu(x) = \varphi_\mu(-x), \quad (22a)$$

$$\Phi'(x) = +\Phi(-x), \quad \Phi'_\mu(x) = -\Phi_\mu(-x). \quad (22b)$$

A jelölés megválasztása úgy történt, hogy  $\varphi_\mu$  az elektromágneses négyespotenciálhoz és  $\frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu}$ -höz hasonlóan transzformálódik [lásd (6)],  $\Phi_\mu$  pedig  $\frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu}$ -höz hasonlóan.

A különböző fajtájú tereknek megfelelő tagok nem keverhetők; a

$$C_1 \varphi (\bar{\psi} \psi) + C_2 \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi} \gamma_\mu \psi)$$

és

$$C_1 \varphi_\mu (i \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi) + C_2 \left( \frac{\partial \varphi_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \varphi_\mu}{\partial x_\nu} \right) (\bar{\psi} \gamma_5 \gamma_{[\mu\nu]} \psi)$$

kombinációk mindketten tiltottak, mint az már ismert<sup>14</sup> (lásd [14], [15], [16]).

Most egy hasonló, de valamivel általánosabb esetet vizsgálunk meg: egy töltött bozon esetét, melyet egy  $\varphi$  komplex skalártér ír le, s amely kölcsönhatásban áll egy töltött 1/2 spinű részecskével, pl. egy protonnal, melyet egy  $\psi_p$  Dirac-spinor ír le, és egy másik, semleges 1/2 spinű részecskével, pl. egy neutronnal, amelyhez tartozó Dirac-féle spinorteret  $\psi_N$ -nel jelöljük. Az eredmény itt némileg különböző,

<sup>14</sup> Itt nem tárgyaljuk azon további megszorításokat, amelyek egyedül a tértükrözés következményei. Ezek nem elégségesek ahhoz, hogy kizárják a szövegben jelzett tiltott kombinációkat.



minthogy itt a kölcsönhatási energiák minden kombinációja felléphet, azonban az együttthatókra *realitási feltételek* adódnak.

A kölcsönhatás Lagrange-sűrűségét a

$$\begin{aligned}
 & C_1 \varphi (\bar{\psi}_P \psi_N) + C_1^* \varphi^* (\bar{\psi}_N \psi_P) \\
 & + C_2 \varphi (i \bar{\psi}_P \gamma_5 \psi_N) + C_2^* \varphi^* (i \bar{\psi}_N \gamma_5 \psi_P) \\
 & + i C_3 \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi}_P \gamma_\mu \psi_N) - i C_3^* \frac{\partial \varphi^*}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi}_N \gamma_\mu \psi_P) + \text{h. k.} \\
 & + C_4 \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi}_P \gamma_5 \gamma_\mu \psi_N) + C_4^* \frac{\partial \varphi^*}{\partial x_\mu} (i \bar{\psi}_N \gamma_5 \gamma_\mu \psi_P) + \text{h. k.} \\
 & + C_5 \varphi_\mu (i \bar{\psi}_P \gamma_\mu \psi_N) + C_5^* \varphi_\mu^* (i \bar{\psi}_N \gamma_\mu \psi_P) \\
 & + i C_6 \varphi_\mu (i \bar{\psi}_P \gamma_5 \gamma_\mu \psi_N) - i C_6^* \varphi_\mu^* (i \bar{\psi}_N \gamma_5 \gamma_\mu \psi_P) \\
 & + \left( \frac{\partial \varphi_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \varphi_\mu}{\partial x_\nu} \right) \{ C_7 (i \bar{\psi}_P \gamma_{[\mu\nu]} \psi_N) + C_8 (\bar{\psi}_P \gamma_5 \gamma_{[\mu\nu]} \psi_N) \} + \text{h. k.} \\
 & + \left( \frac{\partial \varphi_\nu^*}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \varphi_\mu^*}{\partial x_\nu} \right) \{ C_7^* (i \bar{\psi}_N \gamma_{[\mu\nu]} \psi_P) + C_8^* (\bar{\psi}_N \gamma_5 \gamma_{[\mu\nu]} \psi_P) \} + \text{h. k.} \quad (21a)
 \end{aligned}$$

alakba írjuk.

Mielőtt a tükrözést tárgyalnánk, megjegyezzük, hogy a két spinortér és a két bozon-tér szorzása különböző fázistényezőkkel egyenértékű a  $C_1, \dots, C_4$ , ill. a  $C_5, \dots, C_8$  állandók közös fázistényezőkkel való megszorozásával, amelyek így megállapodásszerűen rögzíthetők. Ettől eltekintve a két spinortér (12) transzformációja és az azt követő inverzió lényeges eredménye, hogy minden  $\psi_A O \psi_B$  kifejezés helyére annak  $\bar{\psi}_B O \psi_A$  konjugáltja lép a (20) alatt megadott előjellel. A komplex bozon-térre itt elégséges a (10) transzformációt alkalmazni, kiegészítve a vektor-térre vonatkozó hasonló transzformációval:

$$\begin{aligned}
 \varphi'(x) &= \varphi^*(-x), & \varphi^{*'}(x) &= \varphi(-x); \\
 \varphi'_\mu(x) &= \varphi_\mu^*(-x), & \varphi_\mu^{*'}(x) &= \varphi_\mu(-x). \quad (10a)
 \end{aligned}$$

A (20) előjelek figyelembevétele érdekében (21a) harmadik és ötödik sorába alkalmas  $i$  tényezőket illesztettünk be. Így a következő egyszerű feltételt kapjuk: a  $C_1, \dots, C_8$  együttthatóknak valósaknak kell lenniök, *egységre normálható triviális fázistényezőktől eltekintve*.<sup>15</sup>

Igen hasonló ehhez a protonokat, neutronokat, elektronokat és neutrínókat leíró négy Dirac tér,  $\psi_P, \psi_N, \psi_e$ , ill.  $\psi_n$  Fermi-csatolásának példája. A derivált-

<sup>15</sup> Itt ismét mellőzzük az egyedül a tértükrözésből adódó további megszorítások tárgyalását. Ehhez szükséges, hogy a „pseudo” tagokat, melyek  $\gamma_5$ -öt explicit tartalmaznak, a többiektől elkülönítsük.

mentes kölcsönhatási energiasűrűség (vagy Lagrange-sűrűség) lehetséges általános kifejezése itt

$$\begin{aligned}
 & C_1 (\bar{\psi}_P \psi_N) (\bar{\psi}_e \psi_n) + C_1^* (\bar{\psi}_N \psi_P) (\bar{\psi}_n \psi_e) \\
 & + C_2 (\bar{\psi}_P \gamma_\mu \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_\mu \psi_n) + C_2^* (\bar{\psi}_N \gamma_\mu \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_\mu \psi_e) \\
 & + C_3 (\bar{\psi}_P \gamma_{[\mu\nu]} \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_{[\mu\nu]} \psi_n) + C_3^* (\bar{\psi}_N \gamma_{[\mu\nu]} \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_{[\mu\nu]} \psi_e) \\
 & + C_4 (\bar{\psi}_P \gamma_5 \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_5 \psi_n) + C_4^* (\bar{\psi}_N \gamma_5 \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_5 \psi_e) \\
 & + C_5 (\bar{\psi}_P \gamma_5 \gamma_\mu \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_5 \gamma_\mu \psi_n) + C_5^* (\bar{\psi}_N \gamma_5 \gamma_\mu \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_5 \gamma_\mu \psi_e) \\
 & + C_6 i (\bar{\psi}_P \gamma_5 \psi_N) (\bar{\psi}_e \psi_n) + C_6^* i (\bar{\psi}_N \gamma_5 \psi_P) (\bar{\psi}_n \psi_e) \\
 & + C_7 i (\bar{\psi}_P \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_5 \psi_n) + C_7^* i (\bar{\psi}_N \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_5 \psi_e) \\
 & + i \{ C_8 (\bar{\psi}_P \gamma_5 \gamma_\mu \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_\mu \psi_n) - C_8^* (\bar{\psi}_N \gamma_5 \gamma_\mu \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_\mu \psi_e) \\
 & + i \{ C_9 (\bar{\psi}_P \gamma_\mu \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_5 \gamma_\mu \psi_n) - C_9^* (\bar{\psi}_N \gamma_\mu \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_5 \gamma_\mu \psi_e) \\
 & + C_{10} i (\bar{\psi}_P \gamma_5 \gamma_{[\mu\nu]} \psi_N) (\bar{\psi}_e \gamma_{[\mu\nu]} \psi_n) + C_{10}^* i (\bar{\psi}_N \gamma_5 \gamma_{[\mu\nu]} \psi_P) (\bar{\psi}_n \gamma_{[\mu\nu]} \psi_e) \bullet \quad (23)
 \end{aligned}$$

Itt is a négy spinortér szorzása különböző állandó fázistényezőkkel egyenértékű a  $C_1, \dots, C_{10}$  állandók közös fázistényezővel való szorzásával, mely ennél fogva megállapodás segítségével rögzíthető. Ilyen önkényes fázistényezők léphetnek fel a négy spinortér (14), (15) alatt definiált  $\Omega$  mátrixaiban, ami ismét arra vezet, hogy a WT transzformáció után  $C_1, \dots, C_{10}$  esetleg közös fázistényezőket kapnak. Ettől eltekintve a (12) transzformáció s a négy spinortérre ezt követően alkalmazott inverzió lényeges eredménye itt ismét az, hogy minden  $\bar{\psi}_A O \psi_B$  kifejezés helyére annak  $\bar{\psi}_B O \psi_A$  konjugáltja lép. A (20) alatt megadott előjelek kompenzálódnak, kivéve a  $C_8$  és  $C_9$  állandók előjelét, melyeket ismét egy-egy  $i$  tényezővel láttunk el. Ily módon azt a feltételt kapjuk, hogy a  $C_1, \dots, C_{10}$  együtthatóknak valósaknak kell lenniök (eltekintve egy triviális közös fázistényezőtől, mely egységre normálható). Ez az eredmény is jól ismert (lásd [17], [18]).<sup>16</sup> Összefoglalva láthatjuk:

1. Egy mennyiség valódi Lorentz-transzformációk esetére vonatkozó transzformációs törvénye nem határozza meg egyértelműen annak a WT-vel szemben mutatott viselkedését. Az utóbbi a kölcsönhatási energia feltételezett alakjától is függ.

2. A WT-vel szemben mutatott invariancia további megszorításokat ró ki a kölcsönhatás Lagrange-sűrűségére, túlmenően annak valódi Lorentz-transzformációkkal szemben mutatott invarianciáján.

Az ST tárgyalása meg fogja mutatni, hogy ezen másik esetben éppen ennek ellenkezője igaz: Az ST-vel szemben mutatott invariancia biztosítására semmilyen további megszorítás nem szükséges a valódi Lorentz-invariancián kívül, és valamely mennyiség ST-vel szemben mutatott transzformációs tulajdonsága egyértelműen kö-

<sup>16</sup> Az egyedül a tértükrözésekkel szemben mutatott invariancia itt kizárná a  $C_1, \dots, C_5$  és a  $C_6, \dots, C_{10}$  együtthatókat tartalmazó kölcsönhatások együttes fellépését.

A. S. Wightman és L. Michel oly szívesek voltak és tudomásomra hozták, hogy előkészületben van egy dolgozatuk, melyben részletesen tárgyalni fogják a tértükrözéssel kapcsolatos kérdéseket a  $\beta$ -bomlást leíró kölcsönhatások esetére.



vetkezik annak spinor- vagy tenzor-jellegéből. Ennek általános bizonyítását a 3. §-ban adjuk meg.

Minthogy ST szorzata WT-nek és AK-nak, ez egyenértékű azzal az állítással, hogy az AK-ból ugyanazon további megszorítások adódnak a kölcsönhatási Lagrange-sűrűsége, mint a WT-ből, és hogy valamilyen fajta tenzor vagy spinor WT esetén érvényes transzformációja egyértelműen meghatározza annak AK esetére érvényes transzformációját. (Az irodalomban ezt az utóbbi megállapítást több esetben az előbbi megfontolások elvégzését megelőzően tették.) Az ST-t természetesen leszármaztathatnánk a jól ismert WT és AK transzformációkból, mint azok szorzatát, mi azonban előnyben részesítjük az előbbi közvetlen tárgyalását.

## 2. § (b) Az erős tükrözés (ST)

Az energia-impulzus-sűrűség és a Lagrange-sűrűség (9), (9a) invarianciája itt ugyanúgy érvényes, mint a WT esetében, és a *fent definiált inverzió itt is a transzformáció lényeges részét alkotja*. Ugyanakkor azonban a „töltés”  $Q$  operátorának és a megfelelő  $j_\mu(x)$  áramsűrűségnek itt *per definitionem* előjelet kell váltania:

$$Q' = -Q, \quad j'_\mu(x) = -j_\mu(-x). \quad (24)$$

Innen az elektromágneses térmennyiségekre az (5), (6) alatt állókkal éppen ellentétes előjelek következnek:

$$\varphi'_\mu(x) = -\varphi_\mu(-x), \quad f'_{\mu\nu}(x) = +f_{\mu\nu}(-x). \quad (25)$$

A (7) összefüggésekből következik, hogy itt nem kell áttérni a komplex-konjugált operátorokra.

Skalárookra és spinorokra *Schwinger* szerint a következő egyszerű törvény érvényes (ismét eltekintve egy esetleges állandó fázisú mértéktranszformációtól):

$$\text{skalárokra} \quad \varphi'(x) = \varphi(-x), \quad \varphi'^*(x) = \varphi^*(-x); \quad (26)$$

$$\text{spinorokra} \quad \psi'(x) = \gamma_5 \psi(-x), \quad \bar{\psi}'(x) = -\bar{\psi}(-x) \gamma_5. \quad (27)$$

Az utóbbi képletben szereplő mínusz-előjel felleptét  $\gamma_5$  és  $\gamma_4$  antikommutativitása indokolja, mely utóbbit a

$$\bar{\psi}(x) = \psi^*(x) \gamma_4 \quad (11)$$

képlet tartalmazza. Így (11) a transzformáció után is fennáll. Az önkényes fázistényező, mellyel a (27) transzformáció elvégzése mellett még szorozhatunk, magában foglalja (27) helyettesítésének lehetőségét a

$$\psi'(x) = i\gamma_5 \psi(-x), \quad \bar{\psi}'(x) = -(-i)\bar{\psi}(-x) \gamma_5 \quad (27a)$$

képletekkel. Míg a (27) operáció kétszeri alkalmazása az azonosságot adja, a (27a) alatt felírt második lehetőség kétszer alkalmazva valamennyi spinor jelváltását eredményezi. Itt csupán röviden említem meg, hogy a Majorana-elméletben (ahol a részecskéket és antirészecskéket azonosítják egymással) csak a második, (27a) lehetőség megengedett. A  $\gamma_5$  mátrix szükséges ahhoz, hogy a Dirac-egyenlet továbbra is érvényes maradjon.

A (27) transzformáció fizikai értelme abban áll, hogy minden keltő (elnyelő) operátor helyét az antirészecske megfelelő elnyelő (keltő) operátora foglalja el.

Kvantálás nélkül a (27) transzformáció az áramra nem jelváltást adna, hanem invarianciát. Ami az inverzió hatását illeti, *itt a felcserélési törvények lényegesek*. Ez eltérést jelent WT esetétől, az AK esetében azonban ugyancsak ez a helyzet.

Abból a célból, hogy biztosítsuk az áram (24) alatt jelzett jelváltását, a spinorokra az antikommutátorokkal, a skalárokra a kommutátorokkal elvégzett kvantálást kell feltételeznünk. Ezt a kijelentést oly módon kell értenünk, hogy a (26), (27) transzformációk meghatározott alakját s az inverzió azt követő elvégzését elfogadjuk, mint előfeltevést. Ezen felül a spinorok (17) áramát antiszimmetrizált szorzat alakjában kell felírunk:

$$j_\mu(x) = ie \frac{1}{2} \{ \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \psi(x) - \psi(x) (\gamma_\mu)^T \bar{\psi}(x) \}, \quad (17a)$$

*úgyhogy az inverzió éppen csak jelváltást okozzon. A skalárok árama esetében hasonló módon kell eljárni, szimmetrizálást alkalmazva.*<sup>17</sup> *Ha ezt a kiegészítő szabályt alkalmazzuk, úgy a (26), (27) transzformációk, ha azokat követően elvégezzük az inverziót, az ST-re vonatkozó minden követelményt teljesítenek.*

Rátérve a korábban tárgyalt általánosabb bilineáris alakokra [lásd (20)], most más előjelek adódnak: aszerint + vagy –, hogy  $\gamma_5$  kommutál-e vagy antikommutál a  $\bar{\psi}$  és  $\psi$  között álló mátrixszal. Ily módon a következő előjeltáblázatot kapjuk (az utolsó oszlopot illetően vö. [16]).

	WT	ST	AK
$(\bar{\psi}\psi), i(\bar{\psi}\gamma_5\psi)$	+	+	+
$i\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$	+	–	–
$i\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi$	–	–	+
$i\bar{\psi}\gamma_{[\mu\nu]}\psi \sim \bar{\psi}\gamma_5\gamma_{[\mu\nu]}\psi$	–	+	–

Az egyes vízszintes sorokban a három előjel bármelyike szorzata a másik kettőnek. Az ST esetében a  $\gamma_5$  mátrixnak nincs befolyása az előjelre,<sup>18</sup> a vektorok és az antiszimmetrikus tenzorok úgy transzformálódnak éppen, mint az analóg elektromágneses mennyiségek [lásd (24), ill. (25)], a skalárok pedig invariánsak. A táblá-

<sup>17</sup> Abból a célból, hogy a végtelenségeknek tulajdonítható többértelműségeket elkerüljük, két térmennyiség  $[A(x), B(x)]$  kommutátorát a

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{1}{2} ([A(x-\xi), B(x+\xi)] + [A(x+\xi), B(x-\xi)])$$

képlettel kell definiálnunk.

<sup>18</sup> A „pseudo”-mennyiségek fogalma itt nem létezik, csak külön tér- vagy időtükrözéskor.



zat első oszlopában rövidítést alkalmaztunk, amennyiben mindegyik  $\bar{\psi} O \psi$  kifejezés valójában a megfelelő

$$\frac{1}{2} (\bar{\psi} O \psi - \psi O^T \bar{\psi})$$

antiszimmetrizált alakkal helyettesítendő. Megvizsgálva a (21), (21a) és (23) kölcsönhatási sűrűségeket, láthatjuk, hogy a szorzatok antiszimmetrizálása után azok ST-vel szemben automatikusan invariánsak, ha minden skalár és antiszimmetrikus tenzor invariáns és minden vektor előjelet vált. Ez ténylegesen teljes általánosságban érvényes, ha érvényét az összes eredeti bozon-térre feltételezzük, minthogy az

$$\frac{1}{2} (\bar{\psi}_A O \psi_B - \psi_B O^T \bar{\psi}_A)$$

típusú kifejezésekben ez esetben az  $A$  és  $B$  index nem cserélődik fel. Az ST-vel szemben mutatott invariancia tehát ezen példákban érvényes valamennyi komplex együttható fázisának tetszőleges értéke mellett.

## 2. § (c) Részecske—antirészecske-konjugáció (AK)

Az ST-re vonatkozó ezen eredményeket a WT-re vonatkozó korábbi eredményekkel kombinálva AK-ra a következő egyszerű szabályokat kapjuk (melyeket közvetlenül is lezármaztathattunk volna):

Spinorokra

$$\left. \begin{aligned} \psi'(x) &= C^{-1} \bar{\psi}(x), & \bar{\psi}'(x) &= \psi(x) C; \\ C &= \Omega \gamma_5, & C C^* &= 1, & C^T &= -C, & \gamma_\mu^T &= -C \gamma_\mu C^{-1}; \end{aligned} \right\} \quad (\text{AK})$$

a (21) alatt szereplő kisbetűs valós bozon-terekre (ideértve az elektromágneses potenciálokat) jelváltás, a nagybetűs terekre invariancia adódik:

$$\left. \begin{aligned} \varphi'(x) &= -\varphi(x), & \Phi'(x) &= +\Phi(x); \\ \varphi'_\mu(x) &= -\varphi_\mu(x), & \Phi'_\mu(x) &= +\Phi_\mu(x); \end{aligned} \right\} \quad (\text{AK})$$

a (21a) alatt szereplő komplex bozon-terekre:

$$\left. \begin{aligned} \varphi'(x) &= +\varphi^*(x), & \varphi'^*(x) &= +\varphi(x); \\ \varphi'_\mu(x) &= -\varphi_\mu^*(x), & \varphi'_\mu{}^*(x) &= -\varphi_\mu(x). \end{aligned} \right\} \quad (\text{AK})$$

Az együtthatókra vonatkozó, ugyanazon realitási feltételek érvényesek az AK-ra, mint a WT-re. Az AK szempontjából a terek felcserélési törvényei éppen olyan lényegesek, mint az ST szempontjából nézve.

Bevégezve a konkrét példák tárgyalását,<sup>19</sup> most rátérünk az ST-t illető általános jellegű állításunk bizonyítására.

<sup>19</sup> Ami az izotópspin-formalizmusnak az AK-val való kapcsolatát illeti, utalunk *Michel* igen általános tárgyalására [20], a WT-t illetően pedig *Eisenbud* és *Wigner* dolgozatára [19].

Ami az ST-t illeti, az izotópspin e transzformációval kapcsolatban nem játszik semmilyen szerepet.

### 3. § Az $ST$ -nek mint a folytonos Lorentz-csoport és a spin-statisztika-kapcsolat következményének általános bizonyítása

Feltesszük itt, hogy az elmélet *lokális*, ami azt jelenti, hogy csupán véges rendű, a koordináták szerint képezett deriváltak lépnek fel, és hogy a folytonos Lorentz-csoporttal szemben (rövidítése:  $L_4$ ), mely tükrözéseket nem tartalmaz, minden térmennyiség véges fokú ábrázolás szerint (spinorként vagy tenzorként transzformálódik). Az  $L_4$  csoport *irreducibilis* ábrázolásait rendszerint két számmal jellemzik; erre a célra az  $m, n$  egész számokat választjuk, melyek kétszeresei a megsokszorozott kvantumszámoknak, úgyhogy a szóban forgó ábrázolás foka  $(m+1)(n+1)$ . Két irreducibilis ábrázolás direkt szorzatának felbontása irreducibilis részekre mindenkor ugyanolyan párosságú  $m$ , ill.  $n$  számokat szolgáltat, más szavakkal: az ily módon kapott különböző  $m$  vagy  $n$  számok páros egész számokkal különböznek egymástól. Ez könnyen látható pl. a spinorkalkulusban, mely két index-csoportot vezet be, a pontozott és a pontozatlan indexeket; itt minden index csupán két értéket vesz fel. Az irreducibilis spinorok az indexek minden csoportjában szimmetrikusak, és  $m$  és  $n$  ekkor azonosítható az ezen két csoport egyikébe, ill. másikába tartozó indexek számával. Invariáns operációk csupán: két mennyiség direkt szorzatának képzése és az  $\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1$  antiszimmetrikus tenzorral elvégzett kontrakció, mely az egyik csoport indexeinek számát kettővel csökkenti. Ez azt sugallja, hogy az összes spinort az  $m$  és  $n$  egész számok páros vagy páratlan voltának megfelelően négy osztályba osszuk be [2].

Egy négykomponensű Dirac-spinor két irreducibilis részre bontható fel, melyek az  $(1,0)$ , ill.  $(0,1)$  egész számokkal jellemezhetők, és mindegyikük kétkomponensű. Ezen irreducibilis mennyiségek a  $+1$  és  $-1$  sajátértékekkel rendelkező  $\gamma_5$  mátrixot átlós alakra hozzák. A Dirac-spinorokra alkalmazott

$$\psi' = \gamma_5 \psi \quad (27)$$

transzformáció az  $u(1,0)$  és  $v(0,1)$  irreducibilis mennyiségekre így az

$$u'(1,0) = u(1,0), \quad v'(0,1) = -v(0,1) \quad (27 \text{ bis})$$

egyszerű alakot ölti. Ennek legegyszerűbb általánosítása valamely  $(n, m)$  típusú mennyiségre, melyet  $u(n, m)$ -mel jelölünk, az

$$u'(n, m) = (-1)^m u(n, m) \quad (28)$$

szabály lenne. Valóban,  $(-1)^m$  csak  $m$  párosságától függ; ez azt jelenti, hogy az osztály jellemzője, és két  $u(n', m')$  és  $u(n'', m'')$  mennyiség szorzásakor a jellemzők is összeszorzódnak. Eszerint minden egyenlet, mely a folytonos  $L_4$ -gyel szemben invariáns, érvényes marad, ha minden kovariáns mennyiséget  $(-1)^m$ -mel szorzunk. Minthogy a vektorokra  $n=m=1$ , a (28) transzformáció minden vektorra jelváltást eredményez,<sup>20</sup> és alkalmasnak ígérkezik arra, hogy az  $ST$  általános szabályának szerepét betöltse.

Van azonban egy fontos kiegészítés az utóbbi dőltbetűs kijelentéshez: *feltéve, hogy nem használunk realitási feltételeket*. Minthogy a pontozott és pontozatlan

<sup>20</sup> Az  $(n, m)=(2,0)$ -val vagy  $(0,2)$ -vel jellemzett önduális tenzor és a  $(2,2)$  zérus átlösszegű szimmetrikus tenzor a  $(0,0)$  skalárhoz hasonlóan invariáns marad.



spinor-indexek komplex-konjugált ábrázolások szerint transzformálódnak, s ugyanez érvényes az  $u(n, m)$  és  $v(m, n)$  mennyiségekre is. Az invariáns realitási feltételek ennél fogva az

$$(u(n, m))^* = v(m, n) \quad (29)$$

alakúak.

Nyilvánvaló, hogy egy ilyen feltétel általában *nem* marad változatlan a (28) transzformáció alkalmazásakor, minthogy ekkor a bal oldal  $(-1)^m$ -mel, a jobb oldal pedig  $(-1)^n$ -nel szorozódik, melyek csak akkor egyenlők, ha  $m$  és  $n$  ugyanolyan párosságú (azaz  $m+n$  páros).

Erről Dirac-spinorok felhasználásával is meggyőződhetünk, minthogy (28) általános érvényű alkalmazása maga után vonja a<sup>21</sup>

$$\bar{\psi}'(x) = +\bar{\psi}(-x)\gamma_5, \quad \psi'(x) = \gamma_5\psi(-x) \quad (27F)$$

összefüggéseket, míg

$$\bar{\psi} = \psi^*\gamma_4, \quad (11)$$

mely (29)-nek speciális esete, amint már jeleztük, a

$$\bar{\psi}'(x) = -\bar{\psi}(-x)\gamma_5 \quad (27)$$

képletre vezet.

A (27F) transzformáció ténylegesen *Feynman* elméletében adja a helyes szabályt, mely a Dirac-spinorokat Bose-statisztika szerint kvantálja, *elvetve a realitási feltételeket*. Ebben az elméletben  $\psi^*$  nem hermitikus-konjugáltja többé  $\psi$ -nek, hanem a Hilbert-tér indefinit metrikája alapján képezett „önadjungált” (az elméletben „negatív valószínűségek” lépnek fel) [5]. Ekkor nem ellentmondás többé  $\psi' = \gamma_5\psi$  és  $\psi'^* = -\psi^*\gamma_5$  feltételezése.

<sup>21</sup> Ezt a spinorkalkulus alkalmazásával mutatjuk meg, mely szerint

$$u^1 = u_2, \quad u^2 = -u_1 \quad (R)$$

az  $(u_1, u_2)$  transzformációjának kontragradiense (inverze) szerint transzformálódik. Felhasználásra kerül itt az a körülmény, hogy a transzformáció determinánsának értéke 1. A  $v_1, v_2$  mennyiségek pedig  $u_1, u_2$  komplex-konjugáltjaiként transzformálódnak.

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix}$$

ábrázolás mellett, ahol matrixelemekként mindenütt  $2 \times 2$ -es matrixok állnak,  $\bar{\psi}$  és  $\psi$  négy komponense a következőképpen írható:

$$\psi \sim (u_1, u_2; v^1, v^2), \quad \bar{\psi} \sim (\bar{u}^1, \bar{u}^2; \bar{v}_1, \bar{v}_2).$$

A (11) összefüggésből, azaz a  $\bar{\psi} = \psi^*\gamma_4$  egyenletből ekkor kapjuk:

$$\bar{u}^1 = (v^1)^*, \quad \bar{u}^2 = (v^2)^*; \quad \bar{v}_1 = u_1^*, \quad \bar{v}_2 = u_2^*,$$

ami a (29) alakot mutatja. A  $\bar{\psi}\psi$  és  $(-i)(\bar{\psi}\gamma_5\psi)$  valós invariánsokat ekkor az

$$u_1(v^1)^* + u_2(v^2)^* = u_1v_2^* - u_2v_1^*$$

kifejezés valós, ill. képzetes részének kétszerese adja. Itt a második alak a spinorindexek felhúzásának (R) szabályából következik. Minthogy  $v_1^*, v_2^*$  úgy transzformálódik, mint  $v_1, v_2$ , az utóbbi kifejezés invarianciája nyilvánvaló.

Ennek a matematikai lehetőségnek azonban nincs kapcsolata a fizikával, melynek számára a realitási feltételek lényegesekek. Éppen ezért 1940-ben javasoltam [2] az

$$u'(1,0) = iu(1,0), \quad v'(0,1) = -iv(0,1) \quad (30)$$

transzformációt, mely a

$$v(0,1) = (u(1,0))^*$$

alakú invariáns realitási feltételeket érintetlenül hagyja. Ez ekvivalens a korábban megadott (27a) alternatívával, ti. a

$$\psi'(x) = i\gamma_5 \psi(-x), \quad \bar{\psi}'(x) = i\bar{\psi}(-x)\gamma_5 \quad (27a)$$

transzformációval. Most *egyedül*  $L_4$  *szempontjából* tekintve (a mértékcsoport felhasználása nélkül) következetes az eljárás, minthogy átlós alakú  $\gamma_5$  mellett  $\psi$  és  $\bar{\psi}$  azonos módon transzformálódik.<sup>22</sup>

A (30) transzformáció megfelelő általánosítása nyilvánvalóan

$$\left. \begin{aligned} u'(n, m) &= (-i)(-1)^n u(n, m) = i(-1)^m u(n, m), \text{ ha } n+m \text{ páratlan,} \\ u'(n, m) &= (-1)^n u(n, m) = (-1)^m u(n, m), \text{ ha } n+m \text{ páros,} \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

mely a (29) általános realitási feltétellel összhangban van. Az első sor (30)-ból következik mindazon transzformációkra, amelyek csupán a mennyiségek osztályaitól függenek, a második sor pedig szükségszerű az ST esetben, minthogy a vektoroknak jelet kell váltaniok, míg ugyanakkor a skalároknak változatlanoknak kell maradniok.

Nem merül fel semmilyen nehézség tetszőleges számú, páros  $n+m$ -hez tartozó tényező esetén, melyeket bozon-tereknek nevezhetünk, szemben a páratlan  $m+n$ -hez tartozó fermion-terekkel. Nem hoz semmi újat tetszőleges számú bozon-térnek egy fermion-térrel képezett szorzata sem. Ebben bennfoglaltatik a *terek véges rendű deriváltjai képzésének lehetősége a koordináták szerint*, minthogy a differenciáloperátorok formálisan a páros  $n+m$ -mel jellemzett osztályba tartoznak.

A (31) transzformációs törvény érvénye azonban *általában nem marad fenn két vagy több, a páratlan  $n+m$ -mel jellemzett osztályba tartozó tényező (fermionok) szorzatára*. Vegyük szemügyre  $N$  számú, rendre az

$$(n_k, m_k) \quad (k = 1, \dots, N)$$

szimbólumokhoz tartozó fermion-tényező szorzatát. Legyen

$$n = \sum_{k=1}^N n_k, \quad m = \sum_{k=1}^N m_k;$$

akkor

$N$  páratlan értékeire  $(-i)^N (-1)^n$  az  $(-i) (-1)^n$  tényezővel,

$N$  páros értékeire  $(-i)^N (-1)^n$  az  $(-1)^n$  tényezővel hasonlítandó össze.

<sup>22</sup> Az  $L_4$  csoporttal szemben  $\bar{\psi}$  ugyanúgy transzformálódik, mint  $\psi \Omega \gamma_5 = \psi C$ , ahol  $\Omega$ -t (14) definiálja. Vö. [1].



Ily módon

$N$  páratlan értékeire a  $(-i)^{N-1}$

$N$  páros értékeire a  $(-i)^N$

járulékos tényező lép fel. Egy újonnan bevezetett  $v$  egész számmal ez mind az

$$N = 2v + 1 = \text{páratlan},$$

mind az

$$N = 2v = \text{páros}$$

esetben a

$$(-1)^{2v} = (-1)^v \quad (32)$$

egységes alakba írható.

Ahhoz, hogy ezen járulékos tényező dolgát is rendbe tegyük, most alkalmaznunk kell a második kvantálást, a fermionokra antikommutátorokkal,<sup>23</sup> a bozonokra kommutátorokkal. Ez lehetővé teszi először, hogy megkívánjuk a térmennyiségek minden szorzatának antiszimmetrizálását a fermion-terek összes permutációjára és szimmetrizálását a bozon-terek összes elhelyezkedésére<sup>24</sup> (a szorzatok rendezése).

Ez után ST esetében alkalmaznunk kell az inverziót minden szorzatra (jobbról balra olvasva azokat ahelyett, hogy balról jobbra olvasnánk), az eredeti térmennyiségek (31) transzformációján kívül.

Most bebizonyítjuk a következő lemmát:

*Ha a (31) transzformációt alkalmazzuk az eredeti térmennyiségekre, az inverzió alkalmazását követően ugyanazon (31) törvény érvényes minden, az  $L_4$ -gyel szemben kovariáns mennyiségre, melyet az eredeti térmennyiségeknek és azok véges rendű deriváltjainak rendezett szorzataiból szerkesztettünk meg.<sup>25</sup>*

A lemma bizonyítására egyszerűen megjegyezzük, hogy a (32)-vel definiált előjel egyszersmind karaktere<sup>26</sup> a

$$(1, 2, \dots, N) \rightarrow (N, N-1, \dots, 2, 1)$$

permutációnak is, hogy az inverzió minden szorzatot ezen karakterrel szoroz meg (a bozonok itt nem játszanak semmilyen szerepet). A (32) járulékos tényezőt ennélfogva az inverzió karaktere eltünteti.

A lemma elégséges ahhoz, hogy biztosítsa az ST létezését bármely  $L_4$ -invariáns lokális térelmélet esetére, melyben a szorzatok rendezése megfelelőképpen megtörtént, minthogy minden  $L_4$ -kovariáns téregyenlet valamely meghatározott tenzor- vagy spinorjellegű mennyiséget zérussal tesz egyenlővé, és minthogy a skalároknak az ST-vel szemben mutatott invarianciája (31) szerint csak a skalárok tetszőleges függvényeire terjed ki.

Ezen szakasz megfontolásait két tekintetben lehetne általánosítani. Először tekintetbe lehetne venni az  $L_4$  csoport Wigner által talált, zérus nyugalmi-tömeg-

<sup>23</sup> Ebben bennfoglaltatik, hogy a kinematikailag független spinorterek is antikommutálnak.

<sup>24</sup> Vö. Lüders [13] erre vonatkozó szabályával, melyet a bevezetésben idéztünk.

<sup>25</sup> Még az sem szükséges, hogy az eredeti térmennyiségek, vagy a végeredményképpen megszerkesztett mennyiségek  $L_4$  valamely irreducibilis ábrázolásához tartozzanak. Elegendő, ha egy meghatározott osztályba tartoznak a négy lehetséges közül.

<sup>26</sup> Valamely permutáció karakterén, amint szokásos, a  $+$  vagy  $-$  előjelet értjük, attól függően, hogy a permutáció páros-e vagy páratlan. A (32)-vel definiált előjel a  $(-1)^{N(N-1)/2}$  alakba is írható.

hez tartozó végtelenedfokú irreducibilis ábrázolását, mely a spin-index helyett egy folytonos változót vezet be. Ezt itt azért nem tárgyaltuk, mert úgy látszik, hogy ez az ábrázolás nincs semmilyen kapcsolatban a fizikával.

Másodszor, tovább lehetne vizsgálni ezen megfontolások kiterjesztését a nem-lokális elméletekre. Minthogy az alakfaktorokat szokás szerint nem új tereknek tekintik, hanem skalároknak feltételezik, itt szükséges az a kiegészítő feltevés, hogy az alakfaktor invariáns legyen az összes koordináta jelváltásával szemben.

### Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom R. Jostnak és G. Lüdersnek az „erős tükrözés” általánosságaról folytatott érdekes diszkuszióért. Ugyancsak köszönettel tartozom M. Gell-Mann-nak értékes tájékoztatásáért, melyet a princetoni egyetemen dolgozó kutatócsoportnak a tükrözések problémájával kapcsolatosan kialakított általános felfogásáról nyújtott. Az utóbbi eszmecseréket a Francia Elméleti Fizikai Nyári Iskolán (Les Houches) való részvételem idején, 1952. nyarán folytattuk.

Fordította: Györgyi Géza

### IRODALOM

- [1] W. Pauli, Inst. H. Poincaré Ann. 6, 137, 1936.
- [2] W. Pauli, Phys. Rev. 58, 716, 1940.
- [3] W. Pauli, Rev. Mod. Phys. 13, 203, 1941.
- [4] W. Pauli és F. J. Belinfante, Physica 7, 177, 1940.
- [5] W. Pauli, Progr. Theor. Phys. 5, 526, 1950.
- [6] G. Källén, Helv. Phys. Acta 25, 417, 1952.
- [7] T. D. Lee, Phys. Rev. 95, 1329, 1954.
- [8] W. Heisenberg, Z. Phys. 90, 209 és 92, 692, 1934.
- [9] J. Schwinger, Phys. Rev. 82, 914, 1951.
- [10] E. Wigner, Gött. Nachr. (Math. Naturw. Klasse) 1932, p. 546.
- [11] T. D. Newton és E. P. Wigner, Rev. Mod. Phys. 21, 400, 1949.
- [12] S. Watanabe, Phys. Rev. 84, 1008, 1951.
- [13] G. Lüders, Det. Kong. Danske Videnskabernes Selskab, Mat.-fysiske Meddelelser, 28, Nr. 5, 1954.
- [14] G. Lüders, R. Oehme és W. F. Thirring, Z. Naturforsch. 7a, 213, 1952.
- [15] A. Pais és R. Jost, Phys. Rev. 87, 871, 1952.
- [16] G. Lüders, Z. Phys. 133, 325, 1952.
- [17] L. C. Biedenharn és M. E. Rose, Phys. Rev. 83, 459, 1951.
- [18] H. A. Tolhoek és S. R. de Groot, Phys. Rev. 84, 151, 1951.
- [19] L. Eisenbud és E. P. Wigner, Proc. Nat. Acad. U. S. A. 27, 281, 1941.
- [20] L. Michel, Nuovo Cimento 10, 319, 1953.



Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Dáloki János

A kézirat beérkezett: 1964. X. 19. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 11,2 (A5) ív, 16 ábra

---

Szegedi Nyomda Vállalat 64-1230





A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 42,— Ft

INDEX: 26.491

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Makra Zsigmond</i> : Neutron-dozimetria .....	1
<i>Horváth János</i> : Az entrópiánövekedés problémájáról .....	19
<i>Fogarassy Bálint</i> : A szilárdtestek vezetési tulajdonságairól .....	47

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Pauli</i> : A kizárási elv, a Lorentz-csoport és a téridő s a töltés tükrözése .....	107
--	-----



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XIII. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1965



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK

### FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok közlésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzót megjelent munkájáért 100 különlenyomat illet meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetet és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# RADONMÉRÉS SZCINTILLÁCIÓS MÓDSZERREL\*

TÓTH ÁRPÁD

MÉV Egészségügyi Szolgálat, Pécs

A dolgozatban ismertetjük a módszer alkalmazási területeit, az emanációmérés metodikai lehetőségeit, ezzel kapcsolatban a szcintillációs eljárás döntő előnyeit. A szcintillációs radonmeghatározás mérés technikai alapjainak megvilágítása után közöljük saját műszerünk adatait és módszerünket. Az optimális üzemeltetési feltételek kiderítése kapcsán kísérleti tapasztalatainkat ábrákkal és táblázatokkal illusztráljuk. Szokásos szcintillációs alfaszámlálóból egyszerűen, gyorsan, szinte költséggráfordítás nélkül kialakított berendezésünkkel, könnyen betartható feltételek mellett 0,2 pC egyensúlyi  $\text{Rn}^{222}$ , 2 óra alatt,  $\pm 20\%$  pontosan mérhető. Ezáltal lehetséges a levegőben, vízben, vizeletben megengedett  $\text{Ra}^{226}$  és  $\text{Rn}^{222}$  koncentrációk 0,1–3%-ának a mérése. A radondetektálással kapcsolatos számlálási statisztikai problémák vázolását követően, detektoraink fejlődését, időbeli stabilitását mutatjuk be. Táblázatos áttekintést adunk más szerzők berendezéseiről, majd saját műszerünk paramétereit ezekkel összehasonlítjuk.

## Bevezetés

A radioaktív emanációkat ( $\text{Rn}$ ,  $\text{Tn}$  és  $\text{An}$ , illetve:  $\text{Em}^{222}$ ,  $\text{Em}^{220}$  és  $\text{Em}^{219}$ ) kibocsátó anyagokkal foglalkozó fizikusok, kémikusok és más szakemberek, tudományos, nyersanyagforráskutatási, valamint sugárvédelmi feladataik megoldása során fenti emanációk rendkívül kis (pC szint körüli) mennyiségeinek kvantitatív meghatározását kénytelenek elvégezni.

A szcintillációs emanációmeghatározás bevezetésének szükségességét előjáróban a módszer alkalmazási területeinek részletesebb megvilágításával kívánjuk kiemelni.

### *Alkalmazások a sugárvédelemben*

Munkahelyek és lakószobák levegőjében levő  $\text{Em}^{222}$ ,  $\text{Em}^{220}$ ,  $\text{Ra}^{226}$  meghatározása. Célja: a megengedett szint betartása, illetve az ezekből eredő természetes sugárdózis megállapítása. Ivóvizek  $\text{Ra}^{226}$ ,  $\text{Em}^{222}$ , esetleg  $\text{Em}^{220}$  koncentrációjának mérése. Célja: a megengedett határ kontrollja. A testben maximálisan megengedhető  $\text{Ra}^{226}$ -terhelés megállapítása érdekében lehetet  $\text{Em}^{222}$ -tartalom, illetve kiürülési-sebesség mérés, közvetett módszerrel, szénadszorpciós dúsítással, és ezzel egyidejűleg vizelet  $\text{Ra}^{226}$ -tartalom meghatározás. Cél: a megengedett érték betartásának ellenőrzése. A testben maximálisan megengedhető  $\text{Th}^{232}$  (illetve természetes thorium), — vagy  $\text{Ra}^{224}$  (más néven:  $\text{ThX}$ )-terhelés detektálása a lehetet  $\text{Em}^{220}$  tartalmának közvetlen megmérése útján. Cél: mint előbb. Ebben a közleményben csak az  $\text{Em}^{222}$  (vagyis: a radon) mérésével foglalkozunk.

\* Előadás az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Sugárvédelmi Szakcsoportjának 1964. május 4-i ülésén.

\*\* Érkezett 1964. jún. 17.



### *Alkalmazások a kutatási geofizikában*

Uránium és thorium kutatás terepemanációs méréssel, vagy a természetes vizek  $\text{Em}^{222}$ ,  $\text{Em}^{220}$ ,  $\text{Em}^{219}$ ,  $\text{Ra}^{226}$ ,  $\text{Ra}^{224}$  és  $\text{Ra}^{223}$ -koncentrációjának vizsgálatával. Kőzetek, ércek emanációs koeficienseinek meghatározása. Új érctelepek felderítése bányán belül, az emanáció kiáramlási sebességének mérése segítségével.

### *Alkalmazások az általános geofizikában*

A talaj radon-, vagy thoron-exhalációjának megállapítása. Szabadlevegő emanációtartalmának mérése.

*Alkalmazások a radiokémiában, fizikai-kémiában:* Pl. az emanációt kibocsátó anyag emanáló képességének megváltozásából következtetni lehet az anyag felületének megváltozására, emellett az egyik kristályosodási módosulattól a másikba való átmenetre stb. [1]

A következőkben megemlítjük az emanációmérés lehetőségeit, majd rámutatunk arra, hogy ezek közül miért a szcintillációs módszer a legjobb.

*Az emanációmérés következő módszereit ismerjük:*

a) ionizációs-árammérés húros, torziós, rezgőkondenzátoros, kvadráns, valamint elektrométercsöves elektrométerekkel,

b) ionizációs impulzus-számlálás, szokásos „gyors” impulzus-erősítővel, digitális regisztrálással,

c) ionizációs impulzus-számlálás rezgőkondenzátorral, mint fentnél stabilabb impulzus-erősítővel, „lassú” időbeli kifejlődésű jelek számlálására alkalmas scalerrel,

d) ionizációs impulzus-számlálás rezgőkondenzátorhoz illesztett regisztráló-potenciométer segítségével, a diagramm-papírra rajzolt alfa-beütések szubjektív észlelésével,

e) proporcionális számlálóval való detektálás,

f) fotografiai módszer,

g) az emanáció-bomlástermékek  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$ -sugárzása alapján végzett emanáció meghatározások — szűrőpapíron, vagy elektrosztatikus szűrőn való leüleptetéssel; illetve az emanációknak aktív szénen való adszorbeáltatása és a szénben a radonból keletkező emanációtermékek  $\beta$  és  $\gamma$ -sugárzásának mérése nyomán,

h) szcintillációs-kamrás, cinkszulfidos  $[\text{ZnS}(\text{Ag})]$  metodika. A felsorolt *emanációmérési metodikák* a cinkszulfidos szcintillációs módszerrel szemben — a következő hátrányokkal rendelkeznek.

Az emanáció ionizációs-áram-mérési módszereinek hátrányai: Kis elektrosztatikus kapacitású, nagy töltésérzékenységű elektrométerre van szükség, melynek kezelése nehézkes, terepen sokszor lehetetlen. Jóminőségű szigetelőanyagok szükségesek, ezeket gondosan védeni kell a nedvességtől, portól. Az elektrométer-környezet hőmérsékletének állandósítását meg kell oldani. Konstans feszültségforrások (normál-elem, kamrafeszültség) szükségesek. A háttérionizációs-áram a kamraanyagtól, kamramérettől, környezeti sugárforrásoktól (falak, izotópok) és a kozmikus sugárzástól függ. A háttéráram a hasznos áramot gyakran elfedi. A háttéráram effektusának csökkentési módszerei költségesek (kamra inaktív ólommal való burkolása) és nehézkesek (háttérkompenzáló kamra alkalmazása, amikor is a még mérhető  $\text{Em}$  aktivitás  $2^{1/2}$ -szeresen növekszik). Az eredmények kiértékelése és statisztikai hibájának megállapítása bonyolult. A kamra leszívása-



kor, a szigetelőben, mechanikai feszültség folytán zavaróáram lép fel. A nagyméretű ionok zavaróeffektusa az eredmények megbízhatóságát szintén csökkenti.

A „gyors” impulzuserősítő, ionizációs impulzus-számlálás hátrányai: Mikrofonikusak. Nagy erősítési tényezőjű, bonyolult impulzuserősítő szükséges hozzá. Tiszta „számlálógáz”-t igényel (a számlálógázban legfeljebb 0,001%  $O_2$ -tartalom lehet; oldatok vizsgálatakor, az 5 normál feletti sósav és salétromsav koncentrációk esetén a savgázok elektronbefogása miatt az impulzusszámlálási sebesség csökken). Kamrába jutott nedvesség zavar (álimpulzusok). Az optimális telítési tartományt a (gyűjtő) elektróda méret befolyásolja.

A rezgőkondenzátorhoz kapcsolt „lassú”-impulzus számlálási módszer hátránya az, hogy a speciális, lassú időbeli kifejlődésű jelalakhoz különleges számlálóegység konstruálása szükséges. Egyébként jobb, mint az előbbi impulzus-ionizációs kamrás megoldás, de a kis kapacitás biztosítása, a nedvesség eliminálása itt is fontos, emellett nagy a felbontási ideje.

A rezgőkondenzátorhoz illesztett regisztrálópotenciométeres metodika hátrányai: Az alfa-kiütéseket egyéni hibával számláljuk; ez a művelet fárasztó és nehézkes. A berendezés felbontási ideje 1 sec körüli, ezért jelentős veszteség nélkül csak kis számlálási sebességeket lehet észlelni.

Az emanációmérés proporcionális számlálási módszerének hátrányai: A műszer kezelése nem egyszerű, nedvességre, porra érzékeny. Megfelelő összetételű, tiszta számlálógáz szükséges hozzá.

Az emanációmérés fotografiai módszerének hátrányai: Megfelelő (külföldi) nukleáris emulzió beszerzési nehézségei. Speciális kamra szükséges hozzá. Az eredmények kiértékelése nehéz és hosszadalmas.

A bomlástermékek  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$ -sugárzásai alapján végzett emanáció-meghatározások hátrányai: Az alfa-sugárzás szcintillációs v. proporcionális detektálása csak a bomlástermékeknek nagyterfogatú levegőből, aerosolszűrő anyagra, vagy elektrosztatikus szűréssel fémlapra való lecsapódásakor alkalmazható. Tekintélyes alfa-energia nyelődik el magában az aerosolszűrőben, poros levegő esetén még a leülepített porban is. Az ilyen módszer további hátránya ezenkívül az, hogy nem ismert az emanáció és bomlástermékek közötti radioaktív egyensúly mértéke. Ezt a hátrányt újabban, sikerrel, kettős-szűrős megoldással küszöbölik ki (Blanc, 1960; Jacobi, 1964).

Az emanációtermékek  $\beta$  és  $\gamma$ -sugárzását csak akkor tudjuk hasznosítani, és pl. furatos NaJ, vagy más kristállyal megmérni, ha az emanációt aktív szénscapdán megkötjük.

Hátrány: csak nagyterfogatú levegőnél alkalmazható, folyadékoknál közvetlenül nem. Béta-sugárzásnál komoly önabszorpciók veszteségek jelentkeznek. A leányelemek és az anyaelem — emanáció egyensúlyi fokának ismeretlensége, változékonysága, a leányelemből a szülőelemre való következtetést csak nagy hibával teszi lehetővé.

#### *A cinkszulfidos szcintillációs emanációmérés előnyei*

Szcintillációs alfa-számláló műszerből könnyen, gyorsan, elenyésző költség-ráfordítással állítható elő. Érzéketlen a nedvességre. Környezeti  $\gamma$ -sugárzás (r/h)-s szintekig sem zavarja. Kozmikus sugárzás effektusa általában jelentéktelen. Kezelése, hitelesítése egyszerű. Nem mikrofóniás. Különleges összetételű és tisztaságú



számlálógázt nem igényel (egyedül csak 30 napnál régebb, sűrített levegőt, a pC aktivitás-mérési tartományánál). Felbontási ideje feltétlenül kisebb 1 msec-nél. (Ez az érték egyébként függ az adott cinkszulfidtól, multiplyertől és az elektronika paramétereitől). A megfelelő szcintillációs kamra cinkszulfiddal való ellátása — szilikonzsír és cinkszulfid birtokában — rendkívül egyszerű és gyors művelet. Így a kamra háttérének megnövekedésekor, a régi bevonat kicserélése (és így a kis háttér) percek alatt elérhető. Csekély karbantartás mellett a szcintillációs emanációmérő berendezés, éveken át, megbízhatóan stabilan üzemeltethető. (Lásd később műszerünk hatásfok és háttér stabilitási vizsgálatának eredményeit.) Bár a szcintillációs, cinkszulfidos emanációmérés — megfelelő méréstechnikai feltételek biztosítása mellett — nemcsak a radon ( $\text{Em}^{222}$ ), hanem a thoron ( $\text{Em}^{220}$ ) és aktinon ( $\text{Em}^{219}$ ) meghatározására is alkalmas — mint már korábban említettük is —, a továbbiakban kizárólag a radon-detektálás cinkszulfidos, szcintillációs metodikájával fogunk foglalkozni. Ennélfogva csak a radon és közvetlen, rövid bomlási félidejű leányelemeinek jellemző adatait ismertetjük (1. sz. táblázat). Amennyiben

1. TÁBLÁZAT  
A radon és leányelemeinek jellemzői

Elem	Az elem lényegesebb sugárzás fajtája	Sugárzási energia (MeV)	Bomlási félideő
$\text{Em}^{222}(\text{Rn})$	$\alpha$	5,49	3,825 nap
$\text{Po}^{218}(\text{RaA})$	$\alpha$	6,00	3,05 perc
$\text{Pb}^{214}(\text{RaB})$	$\beta$	0,65	26,8 perc
$\text{Bi}^{214}(\text{RaC})$	$\beta$	3,15	19,7 perc
$\text{Po}^{214}(\text{RaC}')$	$\alpha$	7,68	$2,5 \cdot 10^{-6}$ perc

a radont gázszívágás és radon adszorpció-mentes térbe (pl. cinkszulfid bevonatú kamrába) zárjuk, akkor a radon, a bezárástól számított három és öt óra időtartamban, felsorolt bomlástermékeivel tranziens radioaktív egyensúlyba jut. Ebben az állapotban egyetlen radon bomlásra három alfarészecske (Rn, RaA és RaC') keletkezik, (lásd később a radon-hatásfok képletét). Az elérhető számlálási sebesség ilyenkor a legnagyobb, ezért célszerű, ha ilyenkor észlelünk. Az RaB és RaC  $\beta$ - és  $\gamma$ -sugara, a cinkszulfid kis rétegvastagsága miatt (10 mg/cm<sup>2</sup>, vagy ezalatt), az alfa-detektálást nem zavarják.

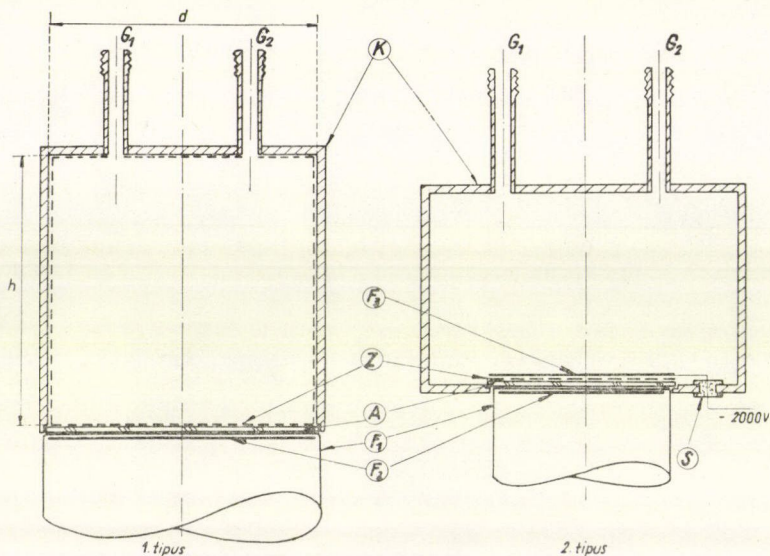
#### *A cinkszulfidos szcintillációs radonmérés méréstechnikai alapjai:*

A szakirodalomban ismertetett (és az egyszerű cinkszulfidos szcintillációs alfaszámlálókból is kialakítható) szcintillációs radonmérő műszereknek két főbb típusát különböztetjük meg, melyeket az 1. sz. ábrán sematikus vázlat mutat be. (A továbbiakban a cinkszulfid használatát külön nem emeljük ki. A kétféle típust, a későbbi hivatkozások egyszerűsítése érdekében, röviden „1. típus” és „2. típus” megjelöléssel látjuk el.)

Az 1. típus: A szcintillációs-kamrás megoldás, az 1. sz. ábra bal oldalán látható. Maga a K kamra henger alakú edény, melynek A alapja fényáteresztő és az  $F_1$  multipler  $F_2$  fotokatódjához eső végablakára fekszik fel. A K kamrát belülről a Z cinkszulfid foszforral [ $\text{ZnS}(\text{Ag})$ ] teljesen bevonjuk, légmentesre képezzük ki és ellátjuk  $G_1$ ,  $G_2$  gázbevezető és -kivezető csővel is. Működési elve megegyezik



a szokásos szcintillációs alfa-számlálók működési elvével, melyet igyekszünk numerikus példával szemléletessé tenni. A kamrába vitt Rn egyetlen alfa részecskéje (energiája: 5,49 MeV) a kamra falán levő ZnS(Ag)-ból mintegy  $N \approx 6 \cdot 10^5$  fotont vált ki. Feltehető, hogy a keletkezett fotonok 97%-a elvész (abszorbeálódik a ZnS(Ag)-ban, az A alapon, a kamrafalról nem az ablak felé verődik vissza (totalis reflexio, stb.). Így a fotonoknak kb. 3%-a jut csak a multiplier  $F_2$  fotokatódjára:  $g \approx 0,03$ , azaz: kb.  $2 \cdot 10^4$  foton. A fotokatód kvantumhatásfoka (kiváltott fotoelektronok



1. ábra. Szcintillációs-kamra típusok  
(jelölések magyarázatát lásd a szövegben)

száma, egyetlen, adott hullámhosszágú fénykvantum hatására) legyen  $K \approx 0,1 = 10\%$ . Így a multiplier első dinódájára kb.  $2 \cdot 10^3$  fotoelektron kerül. Feltéve, hogy a multiplier erősítési tényezője:  $G = 10^6$ , anódjának a földhöz viszonyított kapacitása pedig:  $C = 20 \text{ pF} = 2 \cdot 10^{-11} \text{ Farad}$ , akkor a kimenőjel-amplitúdó maximális értéke a következő képlet alapján [2]:

$$V_{\max} = 1,6 \cdot 10^{-19} \gamma^{1/1-\gamma} \cdot \frac{N \cdot g \cdot K \cdot G}{C} \text{ [Volt]},$$

ahol

$$\gamma = \frac{\text{az elektronikai egység időkonstansa}}{\text{a fluoreszcencia fényfelvillanás időtartama}} = \frac{RC}{\tau}$$

(Amennyiben  $\gamma$  értéke nagy, akkor  $V_{\max} \neq f(\tau)$ , míg ha  $\gamma$  értéke kicsi (tehát  $\tau > RC$ ), akkor  $V_{\max}$  függ a  $\tau$ -tól). Feltételezve, hogy a  $\gamma$  értéke nagy, így a fenti példával

$$V_{\max} \approx 14,4 \text{ [Volt]}.$$

Tehát általában 10 V körüli amplitúdójú jeleket kapunk, melyeket kényelmesen lehet számlálni. Megemlítjük azt, hogy ZnS(Ag) esetén a szcintilláció időbeli le-

csengési idejére  $\tau = 5 - 10 \mu\text{sec}$ , sőt egyes szerzők  $7 \text{ nsec}$  (85%-ban),  $90 \text{ nsec}$  (23%-ban) és  $13 \mu\text{sec}$  (2%-ban) értékeket észleltek [3,4].

A 2. típus: a visszalökődéskor pozitívrá töltődött radonbomlástermékeket elektrosztatikus úton lecsapató eljárás, melynek elvi megoldása az 1. sz. ábra jobb oldalán látható.

Itt az  $F_1$  fotoelektronsokszorozó  $F_2$  fotokatódja feletti végablakára a közönséges szcintillációs alfaszámlálókból használt  $A$  üveg, vagy plexilapra ragasztott, vékony  $Z$  [ $\text{ZnS}(\text{Ag})$ ]-réteg, erre pedig az  $F_3$  alfasugáráteresztő, több ezer voltos negatív feszültségen tartott fémfólia kerül. A negatív töltésű fémfólia, a keletkezéskor pozitív radon-termékeket csaknem kvantitatíve összegyűjti. Ez a fólia — bár elektromosan elszigetelve — részét képezi a literes nagyságrendű, viszont belső felületén cinkszulfid-bevonat nélküli, pozitív feszültségre kötött fémkamrának. Utóbbi szintén rendelkezik a gázbevezetésre és kivezetésre alkalmas  $G_1$ ,  $G_2$  csövekkel. A 2. típusnál főként a radontermékek (az  $\text{RaA}$  és  $\text{RaC}'$ ) alfasugárzása érvényesül, a radon alfasugárzása szinte lényegtelen szerepet játszik. Ezért a 2. típusú kamrák hatásfoka mindig jóval kisebb az 1. típusúakénál. (Lásd később az 5. sz. táblázatot.) Egyébként a feszültségimpulzus kialakulásra az 1. típusnál elmondottak itt is érvényesek, feltéve, hogy a fólián átjutott alfarész energiája elegendő a kellő számú foton előidézésére.

Megjegyezzük, hogy saját kísérleteink ismertetése során a továbbiakban kizárólag az 1. típusú kamrákkal foglalkozunk, bár a szakirodalom áttekintésekor még szóba kerülnek a 2. típusúak is.

## Mérési módszerünk

### Berendezéseink leírása

#### a) Detektoraink ismertetése:

Alkalmazott detektorainkat, az 1960 és 1964 között eltelt időszakban elért fejlődés négy fázisának megfelelően, 2. sz. ábránk mutatja be. A hivatkozás megkönnyítésére, különféle detektorainkat sorrendben az I, II, III, és IV. római számok jelölik. (Az egyik típusról a másikra való áttérés indoklását és részleteket később, a 2. sz. táblázaton ismertetjük.)

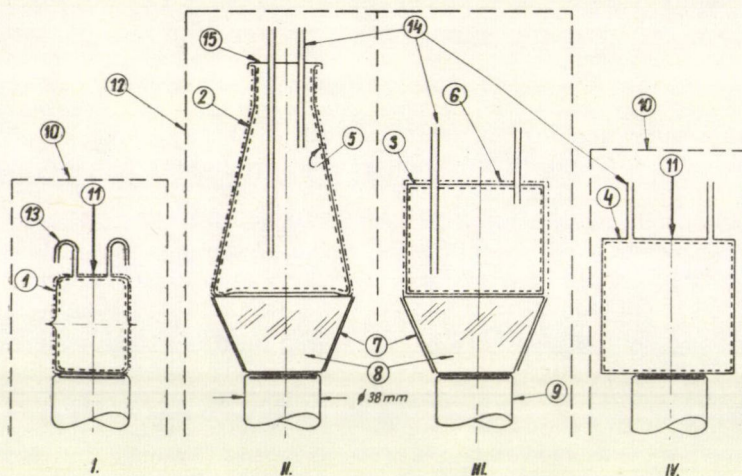
*Használt multipliyerek:* az I. és II.-nél: FEU-19M, míg a III. és IV.-nél: FEU-29. Fotokatódátmérő egyaránt 34 mm.

*Alkalmazott cinkszulfid típusok:* túlnyomórészt hazai gyártmányú „P-11, Tungsram” típusú  $\text{ZnS}(\text{Ag})$ , kis részben hazai „TVK, EIVRT, Vác” típusú, végül szintén csak néhányszor amerikai „RCA 33-Z-20D” típusú  $\text{ZnS}(\text{Ag})$ . (A cinkszulfid típusok összehasonlításakor, később a 4., 5., 6., és 7. ábrákon ezeket a foszforokat egységesen „●”, „▲” és „■” jelekkel illettük. Egyetlen kivétel a 7. sz. ábra, melyen a „P-11”-et „●” helyett, „+”-szal jelöltük.)

A 2. sz. ábrán látható számok jelentése röviden a következő: 1: üveg; 2: Erlenmeyer lombik; 3: plexikamratest; 4: acél kamrapalást és fedőlap, üveg, vagy plexilap; 5:  $\text{ZnS}(\text{Ag})$ ; 6: ezüsfesték; 7: reflektor; 8: fényvezető; 9: multipliyer; 10: fém-szondatest; 11: a csavaros szorítás jele; 12: doboz; 13: üvegcsövek; 14: fémcsövek; 15: lezárosapka vörösréz-ből. Tehát csak az I. jelű detektorunknál egyezett meg a fotokatód és a kamraalap átmérője. Másrészt csak az I. jelű detektornál



volt optimális a kamrameeteknek a Rn, RaA és RaC' alfasugárhatótávolságaival való összhangja. Ennek kedvező hatását mutatja majd a 4. sz. ábrán az I. jelű detektorral nyert legjobb plátó.



2. ábra. Szcintillációs-kamrás detektoraink vázlatos rajzai (jelölések magyarázata a szövegben)

#### b) Alkalmazott számlálóberendezések és tápegységek:

Az I., II. és III. jelű detektoroknál kizárólag a szovjet gyártmányú „TISSZ-TI” alfaszenyezetségmérőt, míg a IV. jelű detektoroknál a „TISSZ-TI” mellett a szovjet „P-349-2” típusú szcintillációs alfa előtétet, a hozzákapcsolható „VSZP” típusú scalerrel együtt üzemeltettük. A „TI”, illetve a „P-349-2” detektorokban a sík cinkszulfid lap helyére illesztettük be szcintillációs kamráinkat. A  $V_F$  multiplier feszültség kb. 200–2000 V-ig folyamatosan szabályozható volt. Stabilitása:  $10^{-1}$ .

#### c) Impulzusregisztrálás módja és holtidő:

A „TISSZ-TI” műszerek esetén, impulzusleosztás nélkül, kizárólag elektro-mechanikus számlálók segítségével észleltünk, melyekre a holtidő, gyári műszaki leírásból:  $t_h \approx 1,66 \cdot 10^{-4}$  perc. Ez csak hitelesítéskor, kb. 100 impulzus/perc (továbbiakban impulzus/perc helyett röviden cpm) felett okozott érzékelhető veszteséget a számlálási sebességben. 100 cpm felett erre mindig helyesbítettünk is. A „(P-349-2 + VSZP)” műszereknél (1:64)-es leosztással dolgoztunk. Gyári műszaki leírás szerint ez esetben a felbontási idő:  $50 \mu\text{sec} = 8,34 \cdot 10^{-7}$  perc. Itt tehát holtidőkorrigálásra nem volt szükség.

#### d) Integráldiszkriminációs áramkörök:

Míg a „TI”-detektoroknál gyárilag beépített vágókörökkel volt lehetőségünk diszkriminálni, addig a „P-349-2” detektorokba utólag kellett beépíteni az erre a célra ( $V_d$  feszültség változtatás) szolgáló, változtatható előfeszítésű diódás áramköröket. A  $V_d$  változtatási tartomány: 0–12 V között, folyamatos.

e) *Üzemelési stabilitás, álimpulzusok:*

Berendezéseink napi 8 órás üzemben, több mint 4 éve csekély időszakos karbantartással, megbízhatóan, stabilan működnek (lásd később a 10. sz. ábrát). Közös hálózati zajokra hátterük nem változik.

*Radonbeviteli módszerek*

Feltételezve, hogy feladatunk kizárólag *oldatok* rádium- vagy radontartalmának meghatározása, mely oldatok, az őket tartalmazó 100 cm<sup>3</sup>-es gázmosópalackoknak legfeljebb felét foglalják el, úgy az oldatokban fejlődött, vagy oldott radon kiűzésére és szcintillációs kamrába vitelére kétféle módszer kínálkozik. (A levegő-radon mintavételnél egyszerűen a kamrába szívatjuk vagy nyomatjuk a levegőt.) Megjegyezzük azt, hogy a radonbeviteli metodika ugyanaz, mind hitelesítéskor (midőn az oldat rádium-, illetve radontartalma pontosan ismert), mind az ismeretlen rádium-, illetve radontartalmú oldatok aktivitásainak megállapításakor.

Lényeges azonban az — relatív módszerről lévén szó —, hogy a hitelesítéskor megteremtett feltételeket (térfogatok, oldathőfok és összetétel, légmentesség, cirkuláltatási időtartam, nyomás a kamrában, aktivitás nagyságrend, korrekciók stb.) pontosan és szigorúan betartsuk az ismeretlen aktivitású minták esetén is. Ennél fogva a radonbevétel két módszerét a következő pontban, a hitelesítések ismertetésekor fogjuk megtárgyalni. Megemlítjük azonban, hogy mi csak a cirkulációs eljárással dolgoztunk. A vákuum-metodika későbbi bevezetése terveinkben szerepel.

## Mérések

A munka ezen részében ismertetjük saját méréseink és kísérleteink eredményeit, valamint gyakorlati tapasztalatainkat.

*Szcintillációs kamrás műszerek hitelesítése*

A hitelesítés cirkulációs, valamint vákuum-módszereinek ismertetéséhez vegyük szemügyre a 3. sz. ábrát. A *cirkulációs metodika vázlatát* a 3/a ábrarész mutatja. Az Ra<sup>226</sup>-jelű rádiumoldatból, szobahőmérsékleten, a *P* gumipumpa és az *N* nyomáskiegyenlítő segítségével, levegőbuborékok által, 15 perces cirkuláltatás nyomán, kiűzzük és a rendszerben egyenletesen eloszlatjuk az ismert  $Q_{Ra}$  (Curie) mennyiségű Ra<sup>226</sup>-ból, ismert *t* (nap) alatt keletkezett  $Q_{Rn} = Q_{Ra}[1 - \exp(-\lambda t)]$  (Curie) értékű összes radonmennyiséget. A  $V_k$  térfogatú szcintillációs kamrába ennek csak

$V_k \cdot (V_\delta + \alpha V_f)^{-1}$ -szerese kerülhet, ahol

$V_\delta$  a cirkulációs rendszer összes levegőtérfogata (liter),

$\alpha$  a radon oldhatósági koeficiense az adott oldatra és  $T^\circ\text{C}$  szobahőmérsékletre (az  $\alpha$  értéke  $T = 20^\circ\text{C}$ -ra és vízre kb. 0,25),

$V_f$  az oldat térfogata (liter),

$\lambda$  a radon bomlási állandója (nap<sup>-1</sup>).

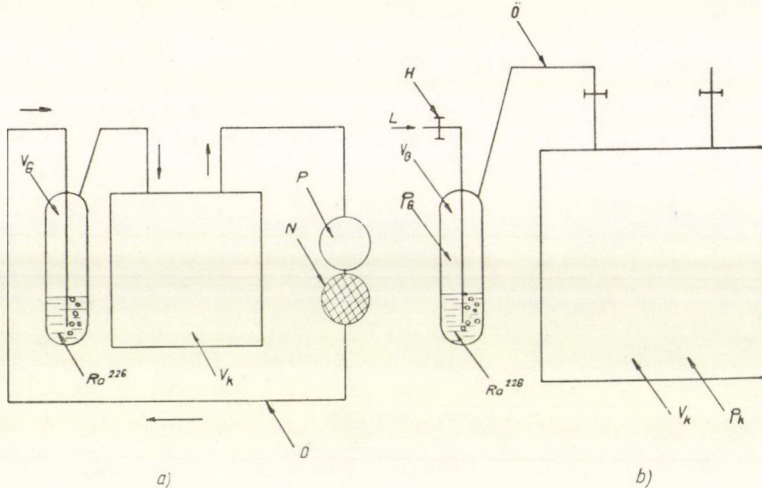
Ezért a kamrába,  $t = 0$  idő körül, véges idő alatt, ismert  $Q_k$  radonmennyiség jut:

$$Q_k = Q_{Ra}[1 - \exp(-\lambda t)] \cdot V_k \cdot (V_\delta + \alpha V_f)^{-1} \text{ [Curie]}$$



Mivel a  $V_f \approx 0,03$  liter, ezért  $(\alpha \cdot V_f) \approx 0$ . Ilyen körülmények mellett az oldhatósági korrekciótól tehát eltekinthetünk.

A cirkulációs-módszer egyszerűbb, mint a vákuum-módszer, viszont hátránya, hogy kis hibával kell a térfogatokat ismerni, emellett pontatlanabb: a radon abszorpcióra és veszteségre nyíló nagyobb számú lehetőség miatt. Cirkulációs-módszer esetén elegendő, ha a  $(V_k/V_G)$ -térfogatarány legfeljebb 2. A módszer részleteit a szerző egyik korábbi dolgozatában találjuk meg [5].



3. ábra. Cirkulációs-, valamint vákuum-módszerek sémája, radonnak a szcintillációs kamrába vitelére (jelölések magyarázatát a szövegben találjuk)

A vákuum metodika, mellyel később kívánunk foglalkozni, a 3/b ábrával ismerethető. A berendezés összeállítása után a  $H$  szorítók megfelelő állásánál a  $V_k$  kamrában vákuumot létesítünk, úgy, hogy a kamrabeli  $p_k$  nyomás:  $p_k < 0,1 \cdot p_G$  legyen, ahol  $p_G$  a nyomás a gázmosóban (légnyomás). Emellett biztosítanunk kell, hogy a  $(V_k/V_G) > 10$  legyen. A szorítók megfelelő nyitásával az ismert  $Q_{Ra}$  rádiumot (és így radont) tartalmazó gázmosón át, az  $L$  radonmentes levegővel, a levegőbuborékok segítségével, a  $V_k$  kamrába üzzük a gázmosóban fejlődött, ismert  $Q_{Rn}$  mennyiségű radont. A radonátvitel időtartamát kb. 10–15'-re választjuk. Tökéletes radon kiűzés biztosítására az átbuborékoltatás alatt a gázmosót lángon melegítjük. A gázmosót ilyenkor visszafolyó hűtővel is ellátjuk (a gőzök visszanyerése érdekében). Bebizonyították [6], hogy ezáltal a gázmosóban fejlődött  $Q_{Rn}$  radonmennyiség az oldatból *kvantitativ* kiűzhető és átvihető a  $V_k$  kamrába. Így jelen esetben

$$Q'_k = Q_{Ra}[1 - \exp(-\lambda t)] \text{ [Curie]}$$

a  $t=0$  körül kamrábajutott radonaktivitás. A kvantitatív átvitel teljesülése két sorbakötött kamrával ellenőrizhető is. A vákuum-metodika tehát bonyolultabb, de pontosabb.

Mindkét esetben a  $t=0$  körüli radon-beviteltől számított  $t=3-5$  óra között, tehát a radon és leányelemei egyensúlyi állapotában, észleljük az ismert  $Q_k$ .

[(Curie) radonaktivitás hatására keletkezett, holtidőre és  $H$  impulzus/óra háttérre korrigált,  $E$  (impulzus/óra) (a továbbiakban röviden: cph) számlálási sebességet.

A radon és bomlástermékeire vonatkozó  $\eta$  teljes számlálási hatásfokot (tovább röviden: radon-hatásfok), a radioaktív egyensúly állapotában, így kapjuk (a képletben, az alkalmazott módszertől függően  $Q_k$ , vagy  $Q'_k$  szerepel, értelemszerűen):

$$\eta = \frac{E [\text{cph}] \cdot 100}{Q_k \cdot [\text{Curie}] \cdot 2,22 \cdot 10^{12} \cdot 6 \cdot 10^1 [\text{Rn bomlás} \cdot \text{óra}^{-1} \cdot \text{Curie Rn}^{-1}] \cdot 3 [\alpha \text{ rész} \cdot \text{Rn bomlás}^{-1}]}$$

$$\eta = E \cdot Q_k^{-1} \cdot 2,5 \cdot 10^{-13} [\%].$$

*Feltételezés:* az egyenkénti számlálási hatásfok megegyező és 100% a Rn, RaA és RaC'-re is!

A mérés technikai gyakorlatban inkább a  $j$  hitelesítési állandót használjuk, melynek értéke adott feltételekre (a radon és termékei közötti radioaktív egyensúly esetében)

$$j = Q_k \cdot E^{-1} [\text{Curie Rn} \cdot \text{cph}^{-1}].$$

A radonhatásfok, valamint a hitelesítési állandó a következő tényezőktől függ: az adott multiplier specifikációi, a multiplierre adott  $V_F$ -feszültség. Az optikai csatolás jósága. A kamramérete és a  $(V_k/V_G)$ -térfogatarány. Térszög, kamra és fotokatód között. Radon és termékeinek kamrán belüli eloszlása; bevárjuk-e, radioaktív egyensúlyuk beállítását, vagy sem? A ZnS(Ag)-bevonat paraméterei. Elektronikai paraméterek (bemenőérzékenység, erősítés,  $V_d$  diszkriminációs szint, időállandók).

A szcintillációs kamrák  $H$  háttérét hasonlóképpen sok faktor befolyásolja. Így például: a multiplier sötétárama, zaj, adott  $V_F$  feszültségnél (lásd később a 2. sz. táblázatunkat). A ZnS(Ag)-bevonat sajátosságai (alfaaktív szennyezettség; szcintillációs fény, illetve foszforeszcencia időbeli lecsengése, alfarészek, vagy szabadfényfotonok általi gerjesztés után). A kamra belső részeinek természetes alfa-aktivitása. A „háttérgáz” radontartalma. Az elemzett radonmennyiségek nagysága, és a kamra használatának ideje (berendezésünk kedvező, kis „háttér-memóriájáról” képet ad későbbi, 11. sz. ábránk alsó része).

#### *Kamratérfogattal súlyozott jósági tényező*

A szakirodalomból ismert sokféle szcintillációs radonmérő műszer egymás közötti összehasonlításához, valamint később saját műszerünkkel való egybevetéséhez is, a következő jósági tényezőt alkalmazzuk, mely két részből tevődik össze [7]:

- a már említett  $\eta$  radon-hatásfokból,
- másrészt a következő függvényből:

$$J = \eta^2 \cdot V_k \cdot H^{-1} [\%^2 \cdot \text{liter} \cdot \text{cph}^{-1}].$$

A  $V_k$  térfogattal való súlyozást, szcintillációs radonmérőkre vonatkozólag ezen cikk szerzője vezette be, mivel az előbbieken láttuk, hogy a  $V_k$  kamratérfogatnak, illetve a  $(V_k/V_G)$ -térfogataránynak hitelesítés és az ismeretlen radonaktivitásmérés esetén egyaránt igen nagy szerepe van. Vagyis több műszer közül az a legjobb — a legkisebb totális mérési időt biztosító — szcintillációs radonmérő, melynek mind a radonhatásfoka, mind a térfogata a legnagyobb, de egyúttal háttére a legkisebb.



Természetesen az alkalmazható kamratérfogatnak véges határai vannak, melyet nagymértékben befolyásol a használt multiplier fotokatódátmérője. Ti. a radonhatásfok csökkenése várható akkor, ha a kamra magassága meghaladja a  $\text{RaC}'$ -levegőbeli hatótávolságát (kb. 7 cm). Ezért csak a kamra-alap, illetve a fotokatód átmérőjének növelésére lehet gondolni. Jó minőségű, nagy fotokatód felületű multiplier-nél a háttér ilyenkor sem növekszik elfogadhatatlan értékűre [8].

Szakirodalmi adatokat alapul véve (lásd később, az 5. sz. táblázatot) az a  $V_k$  térfogat, mely mellett még érvényes a fenti  $J$ -képlet:

a) az 1. kamratípusnál:  $V_k = 2,7$  liter [8],

b) a 2. kamratípusnál:  $V_k = 5,0$  liter [9].

Az összes emanációmérési problémákat tekintve, ezeknél nagyobb térfogatra általában nincs is szükségünk.

Újabban rámutattak arra, hogy az  $M \ll H$  számlálási-sebesség tartományban (ahol  $M$  a háttérnélküli, tiszta számlálási sebesség) az  $(\eta^2/H)$ -tényező helyett célszerűbb az  $(\eta \cdot H^{-1/2})$  tényező használata, mivel az  $M \ll H$  esetben, adott körülmények mellett, a statisztikai hiba értékét a nagyobb  $\eta$  hatásfok nagyobb mértékben redukálja, mint a csökkentett  $H$  háttér. Ezért inkább az  $\eta$  radonhatásfok, illetve az  $M$  számlálási sebesség növelésére, mint a  $H$  háttér csökkentésére kell törekedni.

Az  $M = C \cdot V \cdot \eta$ , ahol  $C$  az elemzendő minta fajlagos aktivitása (ez rendszerint kicsi és adott)  $V$  a minta mennyisége, melyet a lehető legnagyobbra kell növelni, az  $\eta$ -hatásfokkal együtt.\* Később, 5. sz. táblázatunkban, a különféle, irodalomban publikált szcintillációs radonmérő műszereket, az említett  $(\eta^2 \cdot V_k \cdot H^{-1})$  jósági tényezők alapján hasonlítjuk össze.

#### *Műszerünk optimális üzemeltetési paramétereinek megállapítása*

Már láttuk, hogy a  $J$  jósági tényező függ az  $\eta$  radonhatásfoktól és a  $H$  háttértől, az adott berendezés konstans  $V_k$  kamratérfogata mellett. Mivel mind az  $\eta$ , mind pedig a  $H$  egyaránt függnek a  $V_F$  multiplier és a  $V_d$  diszkriminációs feszültségtől, ezért állandó erősítés mellett felvettük a következő görbeseregeket:

a) bomlástermékeivel egyensúlyi radonnal az:

$$\eta = f(V_F)_{V_d = \text{const.}} \quad (\text{lásd a 4. és 5. ábrát}) \text{ míg a}$$

b) „háttér gázzal” a:

$$H = f(V_F)_{V_d = \text{const.}} \quad (\text{lásd a 6. és 7. ábrát})$$

összefüggéseket. Mindezek után, számítással kaptuk a

$$J = f(V_F)_{V_d = \text{const.}}$$

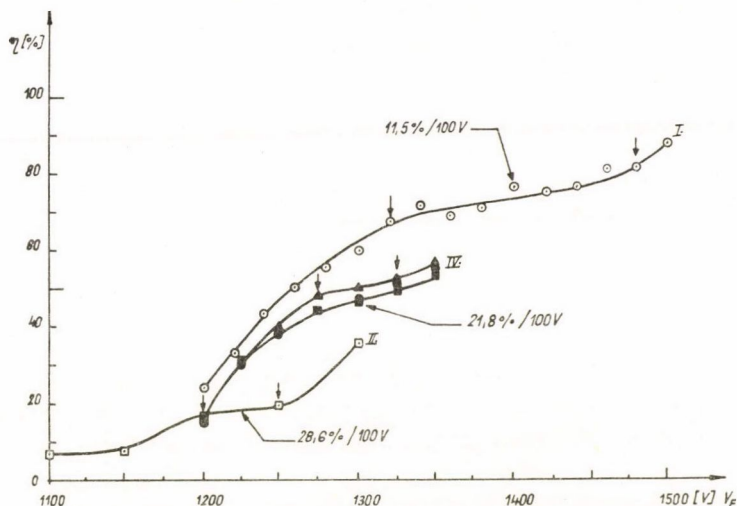
görbeseregeket (lásd a 8. és 9. sz. ábrát). Műszerünkön a 9. ábrabeli görbesereg segítségével azt az optimális  $(V_F, V_d)$  feszültség-értékpárt állítjuk be, mely mellett, aránylag széles  $V_F$  tartományon, maximális és közel állandó is a  $J$  értéke [10].

Mindezek után rátérünk mérési eredményeink, tapasztalataink ismertetésére.

Arról, hogy a szcintillációs kamrába vitt radon, a beviteltől számított 3 óra múlva valóban egyensúlyba jutott-e bomlástermékeivel, úgy győződünk meg,

\* Ha a mintát mérés előtt radiokémiai dúsításnak vetjük alá, akkor természetes az, hogy ezen műveletet is a maximális visszanyerési tényező biztosításával kell végezni.

hogy hitelesítések alkalmával felvettük a kamrabeli alfaaktivitás időbeli növekedési görbáját. Az észlelt görbének,  $t=3$  óra után, az elméletileg számítottal való megegyezése biztosított bennünket berendezéseink helyes működéséről. Mivel minden esetben bomlástermékeivel egyensúlyi radonnal dolgoztunk, ezért a továbbiakban ezt a tényt külön már nem fogjuk kihangsúlyozni.

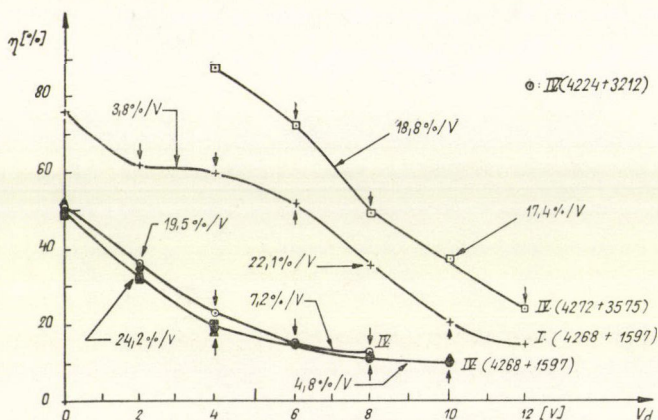


4. ábra. Szcintillációs-kamrás detektoraink plátói radioaktív egyensúlyban levő radon és bomlástermékeivel.

A 4. sz. ábra szcintillációs kamrás berendezéseink plátóit,  $\eta(V_F)$ -görbéit, mutatja. Optimális plátóparamétereket (160 V hosszúság, 11,5%/100 V meredekség) kaptunk az I. jelű detektorunknál, ahol — mint már előbb említettük — közel megegyeztek a kamraalap és a fotokatód átmérői, emellett a kamra belső méretei, legjobban illeszkedtek az  $\alpha$ -részek hatótávolságaihoz. A kamraablaknál a fotokatód negatív feszültsége által indukált negatív elektromos erőter hatósugara, az I. és IV. jelű detektoroknál egyaránt kb. megegyezőnek vehető [8], így a nagyobb kamratérfogatból ugyanazon kis térerő relatíve kevesebb radonterméket vonzott az ablakhoz. Ezért a IV. jelű műszer kamrájánál az ablakra nem vonzott radontermékből emittált  $\alpha$ -részecskék jóval nagyobb (és változó nagyságú) energiavesztéssel érkeztek az ablakhoz, illetve a kamrafalhoz. A kamrabeli sugárzók egyébként is térben (Rn) és a felületeken (RaA és RaC') eloszottan fordulnak elő, így a IV. detektor jeleinek amplitúdó eloszlása „folytonosabb” volt, mint az I. detektoré. Megjegyzendő, hogy a különféle foszfortípusok, szcintillációs kamrák esetében, a plátóparamétereket lényegesen nem módosítják, bár sík alfaforrások esetén az RCA foszfor plátóparamétereket javító hatása méréseink szerint szembetűnő volt. Ez a tény a IV. detektor kamrájában bekövetkező, az I.-hez képest jóval inhomogénebb alfa-energieloszlásra utal. Az I. és II. detektornál egyaránt P-11 foszfort és  $V_d=4$  V-os vágófeszültséget használtunk. A IV. műszernél ugyanezen foszforral és  $V_d=0$  V-al dolgoztunk. A plátótartományokra vonatkozó átlagos, egyszeres statisztikai hibák 6% körüliek. IV. jelű műszereinkkel derítettük ki, hogy a radon-



hatásfok lényegében független a ZnS(Ag)-bevonat felvitelének módjától. Ti. a hibákon belül azonos hatásfokot nyertünk acél és plexi kamrákkal. Az acél- és üveg-felületre szilikonszírral, míg a plexire kloroformos ragasztással készítettünk cink-szulfid-bevonatot. Az így kapott bevonatokat több hónapig, a hatásfok és háttér jelentősebb változása nélkül tudtuk használni (lásd 10. és 11. sz. ábráinkat, a IV. jelű műszerekre nézve). Később, 9. sz. ábránkkal kapcsolatban látni fogjuk, hogy egyik IV. jelű detektorunkkal is sikerült elérni kedvező plátót, de  $V_d=12$  V-nál: hossza: 80 V, meredeksége 4%/100 V volt! Ez egy esetben fordult elő. Ugyanezen műszerrel  $V_d=2$  V-nál a plátóadatok: 100 V és 45%/100 V. Eszerint egyes esetekben hasznos a nagymértékű vágás.



5. ábra. Szcintillációs-kamrás műszereink integrál-diszkriminációs görbéi, bomlástermékeivel egyensúlyi radon esetén.

Az 5. sz. ábrán látjuk szcintillációs kamrás műszereink  $\eta(V_d)$  integráldiszkriminációs görbéit. (Ahol erre külön a figyelmet nem hívjuk fel, ott „P-11 Tungstam” típusú foszforral dolgoztunk). A görbéket  $V_F=1275$ , 1300 és 1325 V multiplier feszültségek mellett vettük fel. Az 5. ábrából levonható tanulság az, hogy a nagy (24,2%/V-os) meredekségek miatt a  $V_d$  diszkriminációs feszültségnek napos, sőt több hónapos labilitása legfeljebb 0,1 V lehet. (Ez a követelmény teljesült is IV. berendezéseinkre, lásd a 10. ábrát.) Másrészt a foszfortípusok sem itt, sem később (a 6., 7. ábrákon) nem befolyásolják lényegesen a görbék alakját.

Az  $\eta(V_d)$  görbék lefutása egyébként folytonos energia-eloszlásra, emellett az I. műszernél nagy, viszont a IV. műszernél kis detektor jelekre és kis  $\alpha$ -energiákra utal [4/a]. Egyébként az 5. ábrára bejelölt plátótartományok pontjaira vonatkozó átlagos egyszeres statisztikai hibák értéke 6% körüli. (Az „egyszeres” megjelöléssel röviden a 67%-os konfidencia-szintre utalunk.)

6. sz. ábránk szemlélteti, hogy a szcintillációs kamrák  $H$  háttére a  $V_F$ -multiplier-feszültség emelkedésével hirtelen, meredeken növekszik. Az üres jelekkel ábrázolt pontoknál  $V_d=4$  V, míg a telt jelek esetén  $V_d=0$  V vágófeszültséggel dolgoztunk. A háttérészlelés előtt a ZnS-bevonatos kamrák már legalább egy óráig sötétben álltak, hogy a szabad fény által kiváltott és méréseink szerint legfeljebb 25 percig tartó foszforeszcencia látszólagos háttérnövelő effektusát biztosan elimináljuk.



A 6. ábra egyes görbéinek minden pontjára vonatkozó átlagos statisztikai hibák értékei: I: 7,6%; II: 14,1%; IV, és P-11: 12,8%; RCA: 18,2; TVK: 14,0%.

A 6. ábrával kapcsolatosan felmerül az a kérdés, hogy a multiplier feszültséggel meredeken növekvő háttér milyen mértékben származik a multiplier és az elektronika együttes zajától, illetve milyen százalékban a szcintillációs kamra saját alfa-aktivitásától? Ezt úgy döntöttük el, hogy  $V_d = 0$  V mellett egyik IV. jelű detektorunkkal (4268 + 1597), legalább 60 napja használat nélkül tárolt acélkamrával és multiplierrel, majd kamra nélkül, csak multiplierrel, azonos körülmények mellett, felvettük a  $H(V_F)$  függvényeket. A kapott eredményeket a 2. sz. táblázat mutatja, ahol a statisztikai hibákat  $N > 10$  impulzus esetén a

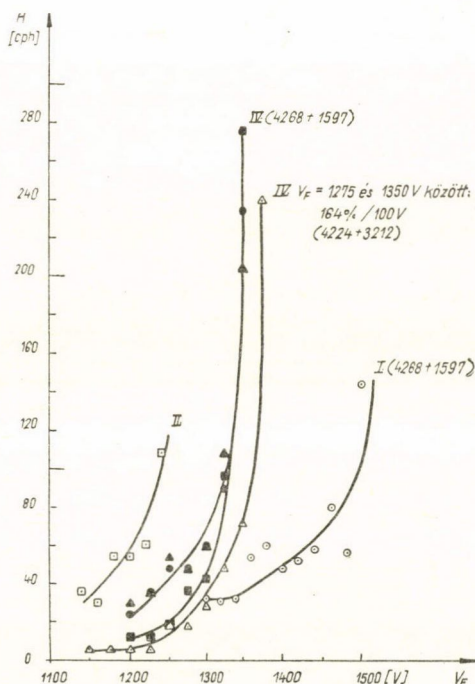
$$\delta = 100 (N)^{-1/2}, \text{ míg } N < 10 \text{ impulzus esetén a}$$

$$\delta = 100 (N)^{-1} \cdot (N+1)^{1/2} \text{ képlettel [11]}$$

számítottuk ki. A háttérarány  $\delta_\theta$  hibáját a négyzetes hibaterjedési törvénynek megfelelően összegeztük. Egyébként az acélkamra belül P-11 cinkszulfid bevonattal rendelkezett, míg a kamra alapját 2 mm-es üveglap képezte, melyet belül szintén ZnS[Ag] réteg borított be.

A 2. sz. táblázat alapján látjuk, hogy a szokásos, 24 cph körüli háttértől felfelé, a háttér túlnyomórészt (72%-át) a multiplier és az elektronika együttes zaja okozza. Ezért, ha berendezéseink háttérét tovább akarnánk csökkenteni — tekintve, hogy IV. jelű detektorainkban nagyobb készletből kis sötétáramra, de emellett még kielégítő erősítésre válogatott FEU-29-es multipliereket használunk — akkor kisebb sötétáramú multiplier-típust kellene üzemeltetni. Már tudjuk, hogy a háttércsökkentés helyett célszerűbb a hatásfok növelése, másrészt újabb multiplier típus esetén műszereinket is teljesen át kellene alakítani.

A 6. ábrával kapcsolatban megemlítjük még, hogy más szerzők is ugyanilyen természetű háttérváltozást (görbelefutást) észleltek síklapú cinkszulfidos, valamint folyadékszcintillációs berendezéseiknél (multiplierok: RCA 5819, illetve RCA 6342), ami szintén



6. ábra. Szcintillációs-kamrás detektoraink háttérének a multiplierre adott feszültségtől való függése.

azt bizonyítja, hogy a háttérét főként a multiplier zaja okozza [12, 13].

A 7. ábránk mutatja berendezéseinkre a háttérnek az integráldiszkriminációs szinttől való függését. Az ábrán, táblázatosan megtaláljuk az egyes görbeszakaszok meredekségeit, valamint a megfelelő multiplierfeszültségeket is. Minden esetben



2. TÁBLÁZAT  
Kamraháttér komponensek vizsgálata

$V_F$ (V)	Multiplier				$\frac{H_1}{H_2}$ (%)	Háttérarány összes hibája $\delta_\delta$ (%)
	Szczintillációs kamra nélkül		Szczintillációs kamrával			
	Háttér $H_1$ (cph)	Háttér észlelés hibája $\delta_1$ (%)	Háttér $H_2$ (cph)	Háttér észlelés hibája $\delta_2$ (%)		
1075	Ø	—	Ø	—	—	—
1100	3	141	9	67	33	157
1125	6	87	6	87	100	123
1150	6	141	18	67	33	157
1175	18	67	12	87	150	110
1200	18	67	24*	56	75**	87
1225	30	49	48	38	63	63
1250	24	56	42	40	57	69
1275	48	38	66	30	73	49
1300	72	29	90	26	80	39
1325	114	23	150	20	76	31
1350	198	17	252	16	79	23
1375	gerjed	—	gerjed	—	—	—

\* normális háttér

\*\* a háttérarány átlagos értéke 1200 V és 1350 V között: 72% (hibája:  $\pm 19,5\%$ )

30 napnál régibb „korú” háttérgázzal dolgoztunk. A 7. ábrából levonható tanulságok a következők: ugyanazon I. jelű műszernél a  $V_F$ -nek 1300 V-ról 1220 V-ra való (kb. 6%-os) csökkentése kb. kétszeres háttérredukciót vont maga után. Ez a 6. ábránál már megtárgyalt eredmény: a  $V_F$  multiplier feszültség stabilan való tartását hangsúlyozza. A IV. jelű detektorok  $V_d$ -jét, a nagy multiplier zaj (75%/V-os meredekség) miatt 2 V fölé kell beállítani. A különböző IV. jelű műszerek  $H(V_d)$  görbéi gyakorlatilag megegyeznek: eszerint nincs eltérés a multipliererek sötétáram karakterisztikájában.  $V_d = 2$  V felett általában (15%/V)-os meredekségek fordulnak elő.

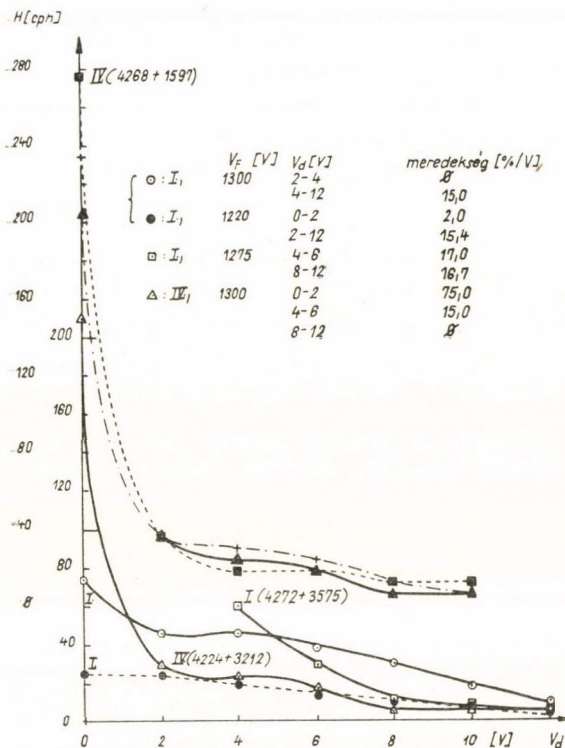
A 7. ábra plátótartományainak pontjaira vonatkozó egyszeres, átlagos statisztikai hibák értékei: 10 és 30% körüliek.

Korábban már említettük, hogy berendezéseink optimális üzemeltetési paramétereinek meghatározása érdekében a hatásfokkal és háttérrel felvett görbesereg-ből számítással állítjuk elő a jósági tényezőre vonatkozó görbecsaládot. 8. sz. ábránk segítségével ezt a műveletet „fejlődésében” követhetjük nyomon. Ezen az ábrán is megmutatkozik az a — több műszerünkkel nyert tapasztalatunk által is megerősített — tény, hogy a maximális  $J$  jósági tényező értékhez tartozó multiplier feszültség éppen az  $\eta(V_F)$  plátógörbe kezdőpontjához tartozó  $V_F$  értékkel esik egybe és nem a plátótartomány középpontjának megfelelő  $V_F$ -el. Ennek oka az, hogy az  $\eta^2(V_F)$  függvény  $M_k$  meredeksége csupán az  $\eta(V_F)$  függvény plátójának kezdetéig haladja meg a  $H(V_F)$  funkció  $m_k$  meredekségét. Ezután, a plátón, már a  $H(V_F)$  függvény  $m_p$  meredeksége a nagyobb. A 8. sz. ábrán feltüntetett meredekségek (különösképpen az  $m_p$ ) értéke csak közelítőleges. A 8. sz. ábrán látható görbékét egyébként a már ismert, kedvező plátóval rendelkező (160 V és 11,5%/100 V),



I. jelű detektorunkkal,  $V_d=4\text{V}$  mellett vettük fel. A  $H$ ,  $\eta$  és  $J$  függvények összes pontjára vonatkozó, egyszeres átlagos statisztikai hibák: 7%, 2,7% és 8,7% értékűek. (A  $J$  összes hibájának számítását lásd később.) A 8. ábra alapján az adott műszerre az optimális  $V_F$  értéke  $V_F=1400\text{ V}$ -ra állítható be, tekintve hogy a  $J(V_F)$ -függvény az  $\eta(V_F)$ -funkció plátótartományán csaknem állandó. A  $V_F=1400\text{ V}$  egyúttal a plátótartomány közepére is esik, így egyúttal a maximális stabilitást is biztosítottuk.

A műszer optimális üzemeltetési feltételeinek megválasztásakor a  $J(V_F)$  függ-



7. ábra. Szcintillációs-kamrás berendezéseink háttérének az integráldiszkriminációs szinttől való függése.

= 12 V-nál viszont, 80 V-on, 4%/100 V volt. A jobb áttekinthetőség érdekében a görbéket függőleges irányban „széthúztuk”.

A 9. ábrából következő tanulság az, hogy a maximális  $J$  jósági tényezőt nyújtó  $V_F$  multiplier-feszültség tartomány aránylag kiterjedt és közel konstans, ha az adott műszer plátóparaméterei kedvezőek, másrészt a  $J_{\max}$ -tartomány csúcshorizonton kiugró ponttá zsugorodik össze, kedvezőtlen plátóparaméterek esetében. Előbbi esetben nyilván nagy, utóbbi esetben pedig kicsi az üzemelési stabilitás.

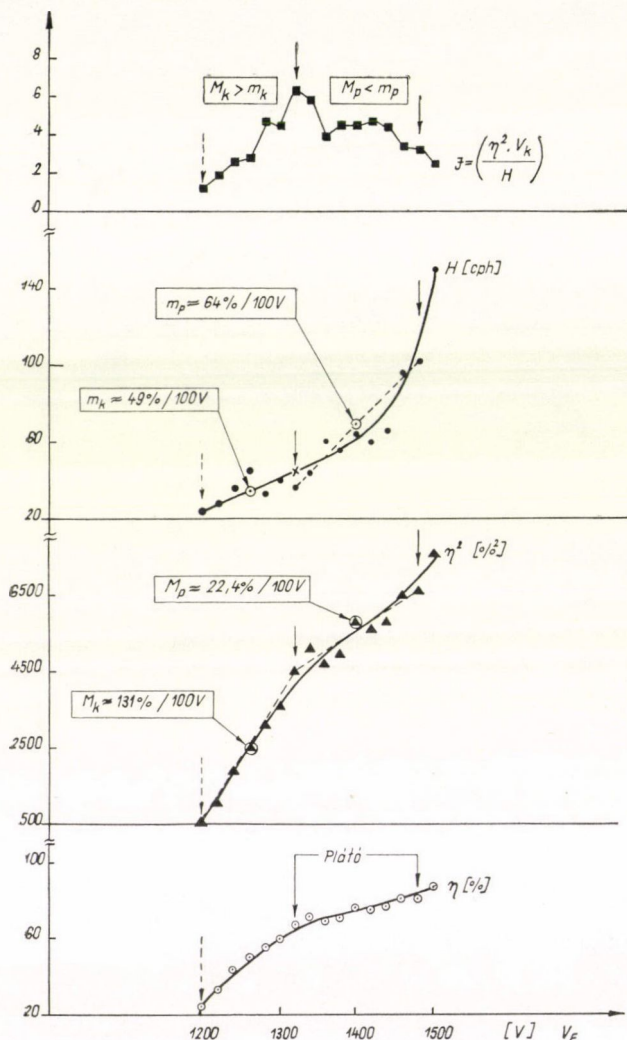
A 9. ábráról még az is látható, hogy a maximális  $J$ -hez tartozó  $V_F$  feszültség-hely, növekvő  $V_d$ -k esetében, egyre nagyobb  $V_F$ -ek felé tolódik el (lásd 9. sz. ábrára,

vénynt nemcsak egyetlen  $V_d$ -nél, hanem az egész rendelkezésre álló  $V_d$ -tartományban célszerű felvenni, először rövid időtartamú, tájékozódó háttér és hatásfok mérésekkel úgy, mint azt a 9. sz. ábránál mi eszközöltük is. Majd ezután, második lépésben, helyes, ha a legkedvezőbb  $J$  jósági tényező tartományhoz tartozó  $V_d$  mellett, hosszabb idejű, pontosabb mérésekből állítjuk elő a  $J(V_F)$ -függvényt. Megjegyezzük azt, hogy a hatásfokmérések időtartama korlátozott; a radonbeviteltől számított 3. és 5. órák közé kell hogy essen, ha nem akarunk bomlási korrekciókat végezni. Másrészt a statisztikai hiba számítása is bonyolultabbá válik (lásd később, a hibaszámításoknál).

A 9. ábrát IV. jelű műszereinkben belül rendelkezésre álló, két különböző berendezésre nézve szerkesztettük meg. Az egyik műszer  $\eta(V_F)$ -plátója kedvezőtlen ( $V_d=2\text{ V}$ -nál hossza: 50 V, meredeksége 214%/100 V!), a másik műszeré pedig  $V_d=2\text{ V}$ -nál, 100 V-on, 45%/100 V;  $V_d=$



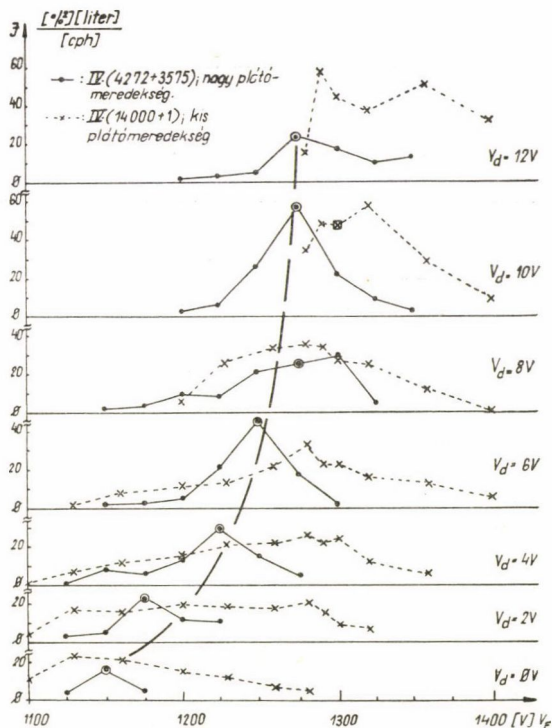
hosszan szaggatottan behúzott görbét). Ez a változás a kedvezőtlenebb plátójú műszer pontszerű  $J$  maximumai nyomán jobban volt követhető, ezért a szaggatott görbét arra nézve húztuk be. A 9. ábra görbéi alapján nyilvánvaló, hogy a kis plátó-



8. ábra. Műszereink optimális üzemeltetési feltételeinek megállapításához: a (jósági tényező-multiplier feszültség) függvény kialakulása komponenseiből.

meredekségű műszert célszerű  $V_d = 10$  V, valamint  $V_F = 1300$  V-nál üzemeltetni, mivel itt, viszonyítva a többi  $V_d$  melletti  $J_{\max}$ -okhoz, kb. 30 V-os  $V_F$  tartományban a  $J$  jósági tényező csaknem a legnagyobb ( $J \approx 50!$ ), emellett alig ingadozik. A 9.

ábrabeli görbék minden pontjára képezett, egyszeres, átlagos statisztikai hibák: a nagy plátómeredekségű műszernél: 30%, a kis plátómeredekségű berendezésnél pedig: 20% körüliek.



9. ábra. Szcintillációs-kamrás detektoraink jósaági tényezőinek feszültségfüggése: az optimális üzemeltetési feltételek beállításához.

Műszerünkkel mérhető legkisebb aktivitások és koncentrációk

A  $Q_{\min}$  legkisebb mérhető radonaktivitás értéke a háttérnél sokkal kisebb ( $M \ll H$ ) számlálási-sebesség-tartományban így írható fel:

$$Q_{\min} \approx \frac{3}{2} \cdot j \cdot (2H)^{1/2} \cdot \delta^{-1} \cdot t^{-1/2}$$

(Curie egyensúlyi Rn), ahol

$M$  a radonmintának háttérre helyesbített számlálási sebessége, (cph)-ban,

$H$  a háttér, (cph)-ban,

$j$  a hitelesítési állandó, (Curie Rn/cph)-ban,

$\delta$  a megszabott egyszeres statisztikai hiba (puszta szám),



$t = t_1 = t_2$ , ahol

$t_1$  a (minta + háttér) mérés ideje, (óra)-ban,

$t_2$  a háttérmérés ideje, (óra)-ban.

A képlet alkalmazásának feltétele: méréseinket szisztematikus hiba nem terhelheti!

A (3/2)-ed értékű tényező onnan származik, hogy a RaA bomlása, nem független a radon bomlásától, mivel a RaA felezési ideje (3,05 perc) mind a radon felezési idejéhez (3,825 nap), mind pedig a nálunk szokásos számlálási időtartamokhoz ( $t=2$  óra) képest kicsi [14, 15].

A RaA-ra tehát a szokásos statisztikai hibaszámítási képletek sem érvényesek [11/a].

Mivel tehát az RaA bomlása a radonétól függ, ezért az RaA-át — független — véletlen fellépés szempontjából el kell hagynunk. Ezért a  $j$  hitelesítési állandó nevezőjében levő  $E$  számlálási sebesség elvileg 2/3-adára csökken, mivel feltételezzük, hogy ilyenkor egyetlen radonbomlásra nem három, hanem csak két alfarészecske emittálódik. Feltételezzük továbbá azt is, hogy a számlálási hatások 100%-ot tesz ki mindhárom (Rn, RaA és RaC') elemre nézve.

Mindezek előrebocsátásával, az előbbi képlet alapján, IV. jelű műszerünknek aktivitásra vonatkozó alsó méréshatára,  $\delta = 0,2$ -re megszabott egyszerűes statisztikai hiba esetén (sugárvédelmi célokra ez kielégítő), valamint a következő, könnyen betartható feltételekre nézve:  $H=25$  cph,  $j = 5,2 \cdot 10^{-15}$  C/cph,  $t=2$  óra: (emellett a számlálási sebességet a radon beviteltől számított 3. és 5. óra között észleljük):

$$Q_{\min} \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{ Curie Rn}^{222} \approx 0,2 \text{ pC Rn}^{222}.$$

Ez jól egyezik más szerzők [16] nemrégén publikált közleményéből a fenti feltételekre kapott értékkel (0,1 pC).

### 3. TÁBLÁZAT

Berendezésünk koncentráció-érzékenysége

Az analizált			Radiokémiai kinyerési tényező	$C_{\min}$ (pC/l)	$C_m$ (pC/l)	$\frac{C_{\min}}{C_m}$ (%)
Közeg		Elem megnevezése				
megnevezése	szükséges térfo- gata $V_{\text{közeg}}$ (liter)					
levegő	2000	Ra <sup>226</sup>	0,6	$3 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-2}$	1,0
vizelet	2	Ra <sup>226</sup>	0,7	$2,4 \cdot 10^{-1}$	13,3*	1,8
levegő	0,25	Rn <sup>222</sup>	1,0	$8 \cdot 10^{-1}$	30,0	2,7
víz	0,05	Rn <sup>222</sup>	1,0	7,0	1000**	0,7
víz	2	Ra <sup>226</sup>	0,7	$2,4 \cdot 10^{-1}$	300	0,08

\* következetes írásra: [17]

\*\* ideiglenes szovjet szint. Újabban (Andersson, Nilsson, 1964) ennél 600-szor nagyobb javasolnak

A  $Q_{\min}$  (pC) mérhető legkisebb radonaktivitás ismeretében, a  $C_{\min}$  mérhető legkisebb koncentrációt így írhatjuk fel:

$$C_{\min} = Q_{\min} \cdot V_{\delta} \cdot \varepsilon^{-1} \cdot V_{\text{közeg}}^{-1} \cdot V_k^{-1} \text{ [pC/liter]}$$

ahol  $V_{\delta}$  a cirkulációs rendszer összes levegőtérfogata, (liter),

$V_k$  a szcintillációs kamra térfogata, (liter),

$\varepsilon$  az adott elem radiokémiai dúsítása, feldolgozása során elérhető ki-nyerési tényező értéke (visszanyert/bevitt mennyiség, pusztas szám).

$V_{\text{közeg}}$  az elemzett közeg (levegő, víz, stb.) térfogata (liter).

A 3. sz. táblázatban soroljuk fel néhány, sugárvédelemben alkalmazott mérés-fajtára, a megengedhető  $C_m$  koncentrációk százalékában vett, mérhető legkisebb koncentrációk értékét. Az alapulvett körülmények a következők:  $Q_{\min} = 0,2$  pC  $\text{Rn}^{222}$ ;  $(V_{\delta}/V_k) = 1,66$  (kivéve a kevegő  $\text{Rn}^{222}$ -mérés esetét, amikor a mintavétel közvetlenül a kamrába történik); az  $\varepsilon = 1$ , levegő és a víz  $\text{Rn}^{222}$ -mérés esetén, mivel itt nincs kémiai feldolgozás;  $\text{Ra}^{226}$ -elemzéseknél a radonfelhalmozódási idő nagyobb, mint 1 hónap; Radonméréseknél a mérést a mintavételtől számított 3 órán belül elkezdjük; vízben a radon-elnyelés elhanyagolható.

*Megjegyzés:* a megjelölés nélküli  $C_m$  értékeket az ICRP 1959-es Ajánlataiból vettük.

A 3. táblázat szerint berendezésünk az említett célokra kitűnően megfelel.

### Hibasámítások, számlálási-statisztikai problémák

#### Hibasámítások

Mivel hatásfokmérések esetén a háttér-számlálási sebesség mindig elhanyagolható volt, ezért az egyszeres statisztikai hibákat egyszerűség kedvéért a már említett

$$\delta = \pm 100 \cdot (N)^{-1/2} [\%]$$

képlettel számoltuk, még az adott észlelési idő alatt beérkezett  $N = 1, 2, 3$ , stb. ( $N < 10$ ) impulzus esetén is. Ez az eset azonban ritkán fordult elő. A 2. sz. táblázatnál ilyen esetben már a helyesebb és említett *Dodson-féle* formulát használtuk [11].

Állandónak tartott  $(V_{\delta}/V_k)$  térfogatarány esetén, a  $j$  hitelesítési állandó összegződött, maximális becsült hibája (mivel ilyenkor a térfogatok hibája kiesik) a következő becsült hibaforrásokból tevődik össze:

- a) a 3%-os pontosságú  $\text{Ra}^{226}$ -standardból hígítással készített, pC-körüli, másodlagos standard összes hibája, kb.: .....  $\pm 5\%$
- b) az egyenetlen radonelosztásból eredő hiba, kb.: .....  $\pm 3\%$
- c) radonvesztések miatti hiba, kb.: .....  $\pm 2\%$
- d) a radonbomlástermékek változó kamrabeli eloszlásából eredő hiba, kb.: .....  $\pm 3\%$
- e) a  $V_F$ ,  $V_d$  feszültségek időbeli instabilitásából eredő hiba (lásd a 10. ábrát): .....  $\pm 3\%$
- f) a holtidő saját hibája, kb.: .....  $\pm 3\%$
- g) a hitelesítéskor észlelt  $E$  számlálási sebesség esetenkénti változó statisztikai hibája: .....  $\pm \delta_E$



Feltételezve, hogy ezek a hibaösszetevők véletlen jellegűek, valamint egymástól függetlenek, ezért a  $j$  maximális, összegződött hibája közelítőleg

$$\delta_j \leq \pm (5^2 + 3^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + \delta_E^2)^{1/2} = \pm (65 + \delta_E^2)^{1/2} [\%]$$

10. ábránk tanúsága szerint ennél csak kisebb hibák fordulnak elő.

A  $J$  jósági tényező összegződött hibáját, a  $V_k$  hibájának elhanyagolásával, a következő közelítő képlettel számítottuk:

$$\delta_J \approx \pm [(2\delta_\eta)^2 + \delta_H^2]^{1/2} = \pm [4\delta_\eta^2 + \delta_H^2]^{1/2} [\%]$$

figyelembevéve, hogy az  $\eta^2$ -nek, mint hatványnak, a relatív hibája egyenlő az  $\eta$  kétszeres relatív hibájával [18]. Hogyha  $\delta_H^2 \gg 4\delta_\eta^2$ , ami gyakori eset, akkor  $\delta_J \approx \delta_H$ -val.

Több esetben felmerült az a kíváncsi, hogy a közvetlen mérések sorozatából kapott átlagértéknek, vagy a mérési adatokból számított adatsorozat (például  $J$  értékek) átlagának a hibáját kiszámítsuk. Mivel az abszolút hibákkal a Gauss-féle négyzetes hibaterjedési törvény alkalmazása hosszadalmas, ezért egyszerűbb közelítő képletet használtunk. Eszerint az egyes  $x_i$  értékek ismert  $\delta_{x_i}$  hibáit abszolútértékben összegezzük:  $\sum_{i=1}^n |\delta_{x_i}|$ , és az  $n$  észlelésből számított  $\bar{x}$  átlagérték hibáját így kapjuk:

$$\delta_{\bar{x}} \approx \pm n^{-3/2} \cdot \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}$$

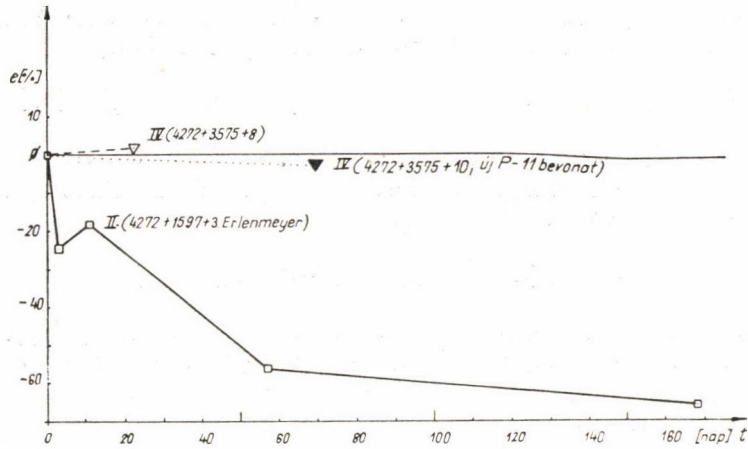
Numerikus példákkal igazoltuk, hogy a fenti képlet az exakt (Gauss-féle) képlettel nyerhető eredménnyel 2%-on belül egyező adatot szolgáltat, ha a  $\delta_{x_i}$  értékek egymás között nem térnek el 20%-nál jobban.

### Számlálási statisztikai problémák

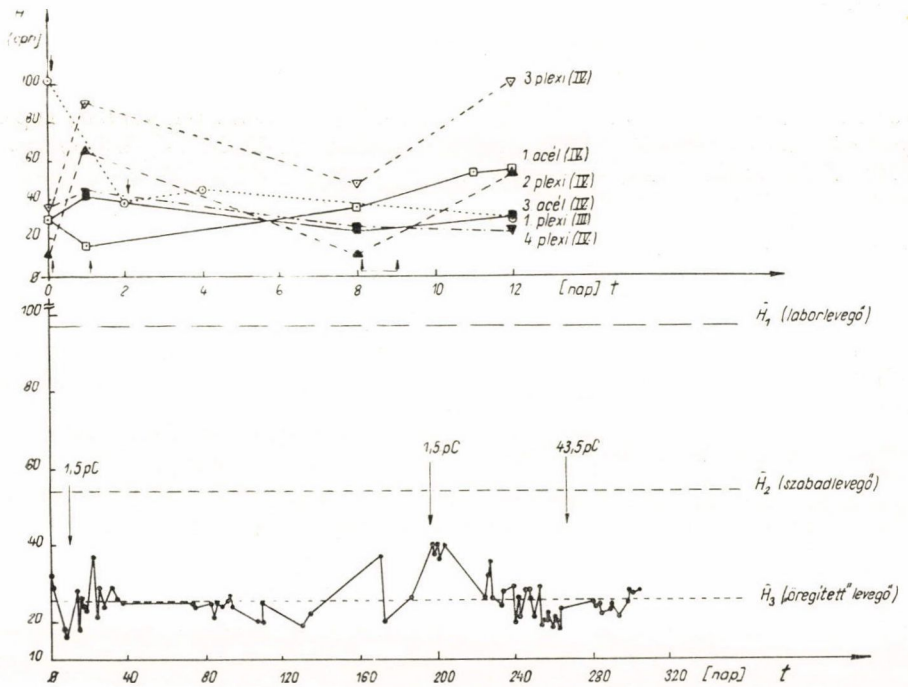
Nemrégiben mutattak rá arra, [19] hogy a radon bomlási sorának többörás, vagy tübbtízórás mérésekor, mivel a leányelemek átlagos élettartama a számlálási intervallumhoz viszonyítva kicsi, és ha emellett még a detektor által felölelt térszög igen nagy, úgy  $N$  impulzus észlelése esetén a standard-deviáció nem  $(N)^{1/2}$ -el, hanem  $(UN)^{1/2}$ -el egyenlő. Az  $U$  értékét a következő tényezők befolyásolják:

- az  $\eta$  térszög (számlálási határfok),
- a  $\Delta t$  számlálási intervallum,
- a radonnak a rádiumtól való elválásától eltelt  $t_e$  idő.

Az említett szerzők táblázatokat szerkesztettek, melyekből extrapolálással számítani lehet a viszonyainkra érvényes  $U$  korrekciós tényező értékét. Saját kísérletekkel mi is kimutattuk, hogy egyre nagyobb  $t_e$  és  $\Delta t$  időértékek ( $t_e = 3^h$ -nál  $\Delta t = 2^m$ , míg  $t_e = 18^h$ -nál  $\Delta t = 20^m$ ) esetén kisebb a különbség az elméleti (a statisztikai törvényekkel számított) és a mérésadatokból levezetett hibák között, bár nálunk az elméleti érték még az utóbbi esetben is nagyobb volt. Ezen kérdés részletesebb vizsgálatát a későbbiekben tervezzük.



10. ábra. Szcintillációs-kamrás műszereink hosszabbidejű maximális radonhatásfok-instabilitása.



11. ábra. Szcintillációs-kamráink háttérének változása az időben, hitelesítések (felső ábrarész), valamint hitelesítések és rutinmérések (alsó ábrarész) közben.



## Eredményeink

### Radonhatásfok-stabilitás

A 10. sz. ábrán a  $t=0$ -beli radonhatásfok ( $\eta \approx 49\%$ ) százalékában kifejezett *e* maximális eltérésnek időbeli változását látjuk. Míg II. jelű berendezéseinknél 169 nap alatt 66%-os hatásfokcsökkenés is fellépett, addig IV. jelű műszereinknél a 69 nap alatti *maximális* hatásfok eltérés, legkevezőtlenebb plátójú műszerünkönél csak 3%, a többi műszer esetén ennél kisebb. Ez a stabilitás céljaira nagyon megfelelő és a feszültségek kielégítő stabilitására mutat. Megjegyezzük, hogy a  $t=0$ -ban, valamint  $t=69$ -ban észlelt hatásfokok különbségének maximális becsült hibája mintegy 20%-ot tesz ki.

### Háttérstabilitás

A 11. ábrán látjuk a szcintillációs kamrák háttérének változásait: az ábra felső részén hitelesítések közben és szabadlevegős szellőztetés mellett; az ábra alsó részén, főleg rutinmérések közben, de következetes *radonmentes*-levegős szellőztetésekkel. A nyílak a hitelesítések időpontjait jelzik. Az összekötött nyílak a radon kamrában tartását reprezentálják. Az „öregített”, radonmentes levegő kb. négyszeres háttér-csökkentő hatása szembeötlő. Az alsó görbe lefutásából a kamra „háttér-memóriájára” is lehet következtetni.

Az 11. ábra *felső* részén levő pontokra a statisztikai hibák számtani átlaga  $\pm 44\%$  körüli, míg az *alsó* görbepontokra a hibák számtani átlaga  $\pm 14,3\%$ . Az alsó görbe  $H_3$  átlagháttérének statisztikai hibája:  $\pm 1,7\%$ .

### Detektoraink műszaki jellemzőinek fejlődése

Detektoraink fejlődését 4. sz. táblázatunkból követhetjük nyomon.

Annak érdekében, hogy műszerünk lényegesebb jellemzőit mások adataival összehasonlíthassuk, az 5. sz. táblázatban külföldi szerzők berendezéseinek paramétereit mutatjuk be.

Az 5. sz. táblázat alapján látjuk, hogy saját IV. műszerünk paraméterei, a hasonló, szintén 1. típusú irodalmi berendezésekre képzett számtani átlagoktól kb. 25%-kal maradnak el. (Bár figyelembe kell venni azt is, hogy újabban  $J=57$  értékű jósági tényezőket is kaptunk (lásd a 4. táblázatot), mely az átlagos 32,2-t túl is lépi. (Ezt azonban — vagyis hogy műszerünkre,  $J \approx 57$ , — még sok méréssel kell megerősíteni.) Mivel az átlagképzés utáni összehasonlítás szubjektív jellegű, még ezt mellőzve is megállapíthatjuk, hogy IV. jelű műszerünk  $J$  értéke 13 esetből 9 alkalommal (tehát az esetek kb. 70%-ban) nagyobb, mint az irodalomban publikáltaké. Másrészt IV. műszerünk radonhatásfoka 13 esetből csak 1 alkalommal nagyobb, mint az 5. sz. táblázatban feltüntetett, bár 5 esetben (az esetek kb. 40%-ban) ezeket maximálisan 10,5%-os eltéréssel megközelíti.

A kisebb hatásfok oka világos: onnan származik, hogy szcintillációs kamráink alapátmérője kétszerese a fotokatódátmérőnek. Ezért a továbbiakban 50 mm, vagy nagyobb fotokatód-átmérőjű multiplerekkel és ugyanilyen kamraalapátmérővel kívánunk dolgozni.

## 4. TÁBLÁZAT

## Detektoraink sajátosságainak áttekintése

Detektorunk 2. ábra szerinti típus- száma	Dátum	Kamra — adatok			Háttér H (cph)	Radon hatás- fok, $\eta$ (%)	Jósági tényező		A következő detektor típusra való áttérés indokai:
		d (mm)	h (mm)	$V_k$ (cm <sup>3</sup> )			$J_{\max}$	$\bar{J}$	
I.	60. 04. 28.	36	49	~ 50	38	67,7	6,4	—	( $V_k/V_G$ )=0,26; nagyon ki- csi. A „háttérgáz” labor- levegő. Nagy a háttér!
II.	61.11. 23-24; 61-62. elején	78; 24 24 az alsó és fel- ső lap átmé- rője	110 110	~ 250 ~ 250	336 ~ 50	48,9 ~ 16,0	1,8 —	— 1,3	Erlenmeyer lombik alja egyenetlen. Optikai csato- lás kedvezőtlen. Az $\eta$ in- gadozik 10 és 25 % között. Sőt, több hónap alatt 66 % kal csökken. Kamra-tar- tódoboz kamra-serék al- kalmával nem tökéletesen fénymentes. Így multi- plier „kifáradhat”. A $J$ kis- sebb, mint az 1. típusnál.
III.	62.05. 28.	70	57	220	38	24,2	3,4	—	Sík-alapú plexikamrák op- tikai illesztése fényvezető- höz nem eléggé erőteljes. A II. típusnál említett kam- ratartó-doboz hátrányai továbbra is fennállnak. Az $\eta$ -ingadozások mér- téke a hibákat extrém ese- tekben kétszeresen is túl- lépi.
IV.	átlag 1963- ra 64.01. 15-17.	68	70	250	24,2 <sup>a</sup>	47,7 <sup>b</sup>	—	23,6	<p><i>Megjegyzés:</i> 250 cm<sup>3</sup>-es acél és 220 cm<sup>3</sup>- es plexikamrák jó optikai illesztéssel, Válogatott multiplierrek. Radonmentes háttérgáz. (<math>V_k/V_G</math>)=2,8.</p> <p><i>Fejlődés az I. típushoz ké- pest:</i> (<math>V_k/V_G</math>)-ben: 10,7-szeres <math>J_{\max}</math>-ban: 8,9-szeres Hosszu idejű hatásfok- stabilitás kitűnő (&lt; 3%/69 nap)</p>
	64.01. 13-17	68	70	250	18 <sup>c</sup>	64 <sup>d</sup>	57	—	
	átlag 1964 elejére	68	70	250	6 <sup>e</sup>	37 <sup>f</sup>	57	—	
		68	70	250	34,3 <sup>g</sup>	51,2 <sup>h</sup>	—	23,0	
I.	64.01. 27.	36	49	~ 50	9	55	16,9	—	„Háttérgáz” radonmentes. <i>Fejlődés 1960-hoz képest:</i> Háttérben: 4,2-szeres $J_{\max}$ -ban: 2,6-szoros

*Megjegyzés:* Mérések száma: a) 533 mérés; b) 24 mérés; (c., d., e., f.): 1—1 mérés (c és d-nél  $V_F=1320$  V;  $V_d=10$  V; e és f-nél:  $V_F=1290$  V, és  $V_d=12$  V); g. és h.: 105—105 mérés (a g hitelesítés-sorozat közben kapott átlag).



## 5. TÁBLÁZAT

Szczintillációs radonmérő műszerek adatai

Szerző és irodalomhivat- kozási szám	A szcintillációs kamra		Átlagos háttér $\bar{H}$ (cph)	Radonhatásfok $\eta$ (%)	Jósági tényező $\frac{\eta^2 \cdot V_k}{H}$
	1. sz. ábrán definiált típusa	térfogata $V_k$ (liter)			
Bryant [20]	2.	2,33	13,5	18,2	57,1
Cowper [9]	2.	1,00	2	15,1	114
		5,00	7	17,5*	218*
Malvicini [21]	1.	0,05	10	90,0	39,7
Van Dilla [22]	1.	0,12	15	75,0	44,4
Harris [23]	1.	0,50	900	70,0	2,7
Lucas [24]	1.	0,096	4,8	83,7	140,1
Simpson [25]	1.	0,194	39	50,4	12,6
Pradel [26]	1.	0,50	120	60,0	15,0
Greig [27]	1.	0,20	60	78,8	20,7
Kaul [28]	1.	2,00	51	51,0	102,5
Higgins [29]	1.	0,125	300	80,0	2,8
Saskin [30]	1.	0,3	120	50,0	6,3
Lenin [31]	1.	0,546	180	49,0	7,3
Gibson [32]	2.	2,33	12	27,7	149,0
RAL-1 [33]	1.	0,625	90	53,3	19,8
EM-6P [34]	1.	0,482	180	37,5	3,8
Collinson [8]	2.	2,70	20**	37,5**	192,0
Számtani átlag	1.	—	—	63,8	32,2
Számtani átlag	2.	—	—	25,2	154,0
Saját IV. műszer (1963. átlag)	1.	—	—	47,7	23,6

\* Átlagolásba bevett értékek.

\*\* Fólia nélkül, csak a fotokatód 3 V/cm körüli elektromos terével.

*Műszerünk előnye* az irodalomban publikáltakhoz képest az, hogy meglevő szcintillációs alfa-számlálókiból egyszerűen, rövid idő alatt minimális mechanikai munkák (kamrakészítés) után, csaknem költség nélkül állíthatók elő, az elektronika változtatása nélkül.

Ezzel szemben az irodalom áttekintéséből nyilvánvaló, hogy a publikált berendezések egyedi konstrukciók, melyhez jelentős tervezési és előállítási költségbefektetés, emellett elkészítésükhöz hosszabb idő volt szükséges. Kisebb intézetek, laboratóriumok ezért közölt megoldásunkat sikeresen alkalmazhatják.

Az 5. sz. táblázattal kapcsolatban még megemlítjük azt, hogyha az abban felüntetett bármelyik két műszer (jelük legyen 1, illetve 2)  $(\eta^2 \cdot V_k \cdot H^{-1})$  jósági tényezőinek  $A_A$  aránya helyett, az  $(\eta \cdot V_k \cdot H^{-1/2})$  jósági tényezők  $A_B$  arányára vagyunk kíváncsiak, akkor ezt könnyen megkaphatjuk, mivel:

$$A_B = A_A \cdot (\eta_2 \cdot \eta_1^{-1}) (H_1 \cdot H_2^{-1})^{1/2}.$$

### Későbbi kutatási tervünk

Mivel jelenlegi szcintillációs berendezésünk 0,8 [pC/1 levegő] értékű érzékenysége nem felel meg arra, hogy dúsítási eljárás nélkül leheletrádon mérésre alkalmazzuk, ahol legalább 0,1 pC/1-es érzékenységre van szükségünk, ezért meglevő 50 és 111 mm Ø multiplyereinkhez különböző, maximálisan  $V_k=2$  literig terjedő térfogatú kamrákat kívánunk készíteni. Ezzel a kamrasorozattal, a (jósági tényező — kamratérfogat) összefüggés felvétele útján, kívánjuk meghatározni azt a  $V_k$ -térfogatot, mely mellett a jósági tényező maximális.

### Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondok Péter József technikusnak a mérések gondos elvégzéséért, Zsoldos Tibor vegyésznek a kamrabevonatok elkészítéséért, Fehér Istvánnak a KFKI Sugárvédelmi Osztályvezetőjének értékes megjegyzéseiért.

### IRODALOM

- [1] „Sbornyik prakticeszkih rabot po radiohimii”, Izdat. Leningradsk. Universziteta, 1956, p. 127.
- [2] L. C. L. Yuan—Wu: „Methods of Experimental Physics”, Orosz kiadás, Moszkva, 1963, p. 157.
- [3] S. C. Curran: „Luminescence and the Scintillation Counter”, Butterworths Sci. Publ., London, 1953, p. 131.
- [4] V. Kment—A. Kuhn: „Technik des Messens Radioaktiver Strahlung” Akad. Verlagsges., Geest Portig K. G., Leipzig, 1960, p. 170.
- [4a] Ibid., p. 539—542.
- [5] Tóth Árpád, Geofizikai Közlemények, VIII. kötet, 279—295, 1959. (Referálva: Skougstad, Anal. Chem. 35, No. 5, 179R—204R, 1963. ápr.)
- [6] D. A. Holaday et al., Am. Publ. Health Service Publication, No. 494, 1957.
- [7] R. Loevinger, M. Berman, Nucleonics 9, No. 1, 26—39, 1951.
- [8] A. J. L. Collinson, A. K. M. Haque, J. Sci. Instrum. 40, No. 11, 521—523, 1963.
- [9] G. Cowper, S. D. Simpson, AECL — 78, 8 p., 1953.
- [10] C. P. Haigh, Nucleonics 12, No. 1, 34—39, 1954.
- [11] R. W. Dodson, in: G. Friedlander—J. W. Kennedy: „Nuclear and Radiochemistry”, Fourth Printing, Feb. 1960., p. 264, J. Wiley-Sons, Inc., New York—London.
- [11a] Ibid., p. 258—259.
- [12] J. Kulp et al., Trans. Am. Geophys. Union 33, No. 1., p. 106, 1952.
- [13] J. K. Basson, Anal. Chem. 28, No. 9., p. 1473, 1956.
- [14] Wm. D. Urry, Am. Journ. Sci. 239, No. 9., 633. 1941.
- [15] L. F. Curtiss—F. J. Davis, National Bureau Standards Res. Paper RP 1557, p. 194, 1943.
- [16] B. Altshuler—B. Pasternack, Health Physics 9, No. 3., p. 293—298, 1963.
- [17] J. B. Hursh, UR-522, 12 p., 1958.
- [18] Ja. Sz. Bjezikovics: „Közelítő Számítások”, Tankönyvkiadó, Budapest, 1952, 33. oldal.
- [19] H. F. Lucas—D. A. Woodward, ANL-6646, p. 78—92, 1963.
- [20] J. Bryant, M. Michaelis, RCC/R26. (The Radiochem. Centre, Amersham) 23. p., 1951.
- [20a] Sept. 10.
- [21] A. Malvicini, Nuovo Cimento 12, No. 5, 821—823, 1954.
- [22] M. A. Van Dilla, D. H. Taysum, Nucleonics 13, No. 2, 68—69 1955. Feb.
- [23] W. B. Harris, H. D. Le Vine, S. I. Watnick, A. M. A. Arch. Ind. Health. 15, No. 6., 493—498, 1957. Dec.
- [24] H. F. Lucas, Rev. Sci. Instrum. 28, No. 9, 680—683, 1957. Sept.



- [25] *S. D. Simpson et al.*, Geneva Conf. 1958., Vol. 23, P/219, 195–196, 1958.
- [26] *J. Pradel, F. Billard*, Geneva Conf. 1958, Vol. 23, P/338, 313–318, 1958.
- [27] *J. D. Greig*, Internat. Journ. Appl. Radiat. Isotopes 11, 101–107, 1961.
- [28] *A. Kaul, H. Muth*, Proc. IX<sup>th</sup>. Internat. Congr. of Radiology, Vol. 2, 1391–1396, 1961,
- ed. *B. Rajewsky*, Stuttgart, G. Thieme Verlag.
- [29] *B. Higgins et al.*, Journ. Am. Water Works Assoc. 53, 63–74, 1961.
- [30] *V. L. Saskin*, „Metodü analiza jesztesztvennüh radioaktivnüh elementov”, Goszatomizdat, 1961, 35–38. oldal.
- [31] *Sz. Sz. Lenin et al.*, Atomnaja Energija 12, No. 5., 429–431, 1962. május.
- [32] *J. A. B. Gibson*, AERE-R-4165, 19 p., 1963.
- [33] *A. L. Jakubovics*, „Uszkorennüh analiz mineralnovo szürja ...”, Goszatomizdat, 1963.
- 67–70. oldal.
- [34] Az „EM-6P” műszer gyári műszaki leírása, 1963.





# A LUMINESZKÁLÓ ANYAGOK ABSZORPCIÓS ÉS FLUORESZCENCIA- SPEKTRUMAI KÖZÖTTI KAPCSOLATRÓL\*

SZALAY LÁSZLÓ, HEVESI JÁNOS és KOZMA LÁSZLÓ  
József Attila Tudományegyetem Kísérleti Fizikai Intézete, Szeged

A jelen dolgozatban a szerzők rövid összefoglalást nyújtanak a lumineszkáló anyagok abszorpciós és fluoreszcencia-spektrumai között fennálló kapcsolatokról, különös tekintettel a gőz-, folyadék- és szilárd rendszerekre egyaránt érvényesnek feltételezett Sztjepanov-féle relációra. Az utóbbinak szükségessé vált módosítása a lumineszcencia-jellemzők közötti újabb kapcsolatok felismerésére vezetett. E kapcsolatok tanulmányozása során a szerzők megvizsgálják a fluoreszcencia-színkép, a hőmérsékleti sugárzási színkép és a kvantumhatások összefüggését, valamint a kioltásnak, a gerjesztőfény frekvenciájának és az oldószernek erre az összefüggésre gyakorolt befolyását. Kimutatják, hogy a tiszta elektronátmeneti frekvenciánál nagyobb frekvenciájú fénnyel való gerjesztés a gerjesztett molekula környezetében az oldatnál nagyobb „lokális hőmérsékletet” eredményezhet, és ennek alapján lehetőség nyílik a gerjesztett molekulák és a közeg kölcsönhatásának vizsgálatára is.

## Bevezetés

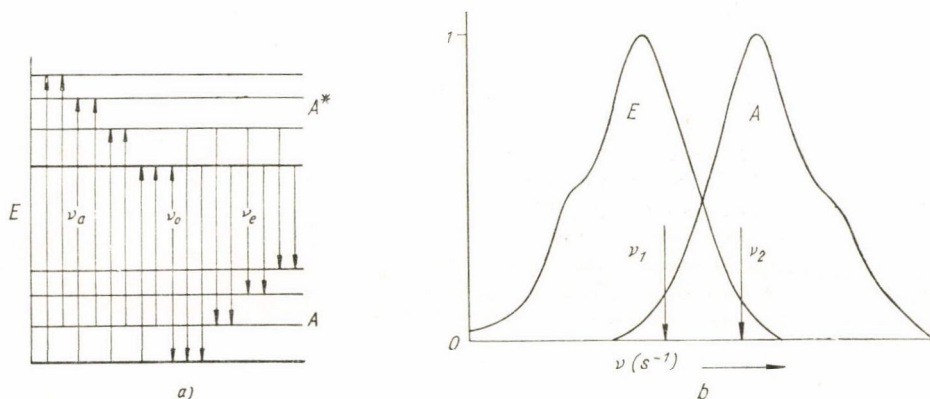
A lumineszcencia-jellemzők, nevezetesen az  $f_c(\nu)$  emissziós spektrum, az  $\eta$  hatásfok, a  $p$  polarizációs fok és a  $\tau$  csillapodási idő, valamint a  $k(\nu)$  abszorpciós spektrum meghatározása és ezek különböző tényezőktől való függésének megállapítása képezi a lumineszcencia törvényeire vonatkozó ismereteink legfőbb forrását. Hasonlóan fontos szerepe van a lumineszcencia-jellemzők közötti kapcsolatok felderítésének is. A lumineszcencia-jellemzők és a közöttük levő összefüggések tanulmányozása, valamint a különböző tényezők ezekre gyakorolt befolyásának vizsgálata a többi között felvilágosítást adhat a lumineszkáló anyagok molekuláinak szerkezetéről, a molekulák közötti kölcsönhatásokról, továbbá a fényelnyelés és fénykibocsátás finomabb részleteiről is.

A lumineszcencia-jellemzők definíciójára és meghatározásuk módjára itt nem térünk ki, ezeket *Ljovsin* [1] és részben *Vavilov* [2] monográfiái tartalmazzák. Fontos feladatnak lehet tekinteni a primér fluoreszcenciafény által kiváltott szekunder-fluoreszcencia zavaró hatásának megállapítását és olyan relációk, ill. mérési eljárások megadását is, amelyekkel a közvetlenül mért lumineszcencia-jellemzőkből a valódi jellemzők meghatározhatók. Az ezzel kapcsolatos kérdéseket *Budó* [3] foglalta össze. A következőkben ismertetendő valamennyi saját vizsgálatainkkal kapcsolatos lumineszcencia-jellemző mérésénél a [3]-ban megadott eljárásokat alkalmaztuk.

A lumineszkáló anyagok abszorpciós és fluoreszcencia-spektrumai közötti kapcsolat legegyszerűbb alakjában az igen kis nyomású, kevés atomból álló molekulájú gőzöknél a rezonanciafluoreszcenciában mutatkozik meg; az emisszióban ez esetben csupán olyan hullámhosszak fordulnak elő, mint amilyenek az abszorp-

\* Érkezett 1964. júl. 13.

cióban szerepelnek. Nagyobb nyomású és sokatomos molekulákból álló gőzöknél, és még inkább *oldatoknál* mind az abszorpcióban, mind az emisszióban csupán sávcsoportok „súlypontjai” figyelhetők meg, és ezekre érvényes a *Stokes-szabály*, amely szerint a fluoreszcenciaspektrum súlypontja mindig hosszabb hullámoknál helyezkedik el, mint az abszorpciós spektrumé. Ez annak a következménye, hogy nem nagyon mély hőmérsékleteken sem az  $A$  (elektron-) alapállapot, sem az  $A^*$  gerjesztett állapot magasabb rezgési termjei nem üresek, és így az emissziós színkép nagyfrekvenciájú területének egy része egybeeshetik az abszorpciós színkép kisfrekvenciájú területével (1/a. ábra). A valóságban a rezgési sávok feloldhatatlanok és a helyzetet jobban tükrözi az 1/b. ábra: az *abszorpciós és emissziós spektrumok átfedése* a jelenség eredménye. Ilyenkor a  $\nu_1$  kisfrekvenciájú gerjesztésre fellép a  $\nu_2$  nagyfrekvenciájú emisszió is. Mind ez a (termikus energia rovására elgondolható) ún. *antistokesi gerjesztés*, mind pedig a gerjesztett molekuláknak az  $A^*$  gerjesztett állapot rezgési szintjein az emisszió előtti (termikus energia fellépésével járó) újraeloszlása arra mutat, hogy a lumineszkáló részecske és a környezete között termikus kölcsönhatás lehetséges. A Stokes-szabállyal kapcsolatban csupán ezt a körülményt kívánjuk kiemelni, egyebekben az  $e$  szabállyal összefüggő igen szerteágazó kutatásokat illetően utalunk *Ljovsin* monográfiájára ([1], 104. old.).



1. ábra

A lumineszkáló anyagok abszorpciós és fluoreszcencia-spektrumai közötti kapcsolat egy másik, igen általánosan fennállónak bizonyult megnyilvánulása a *tükör-szimmetria-szabály*. Eszerint — egyik megfogalmazásban — a rezgésszám függvényében megfelelően ábrázolt abszorpciós és emissziós színképek a metszéspontjukban a frekvenciatengelyre bocsátott merőlegesre vonatkozólag tükörszimmetrikusak. Ez a — legtöbbször csak közelítőleg érvényes — szabály teljesül, ha az  $A$  és  $A^*$  állapotokban levő rezgési szintek között a  $\nu_0$  tiszta elektronátmeneti frekvenciára nézve inverz átmenetek (pl.  $\nu_a$  és  $\nu_e$ ) vannak, és azok megegyező gyakoriságúak.

Az eredetileg *Ljovsin* [1] által megfogalmazott tükörszimmetria-szabály *Blo-hincev* [49] szerint a következő alakban adható meg:

$$\frac{f_a(\nu)}{\nu^3} = \text{const} \frac{k(2\nu_0 - \nu)}{2\nu_0 - \nu}, \quad (1)$$



ahol  $f_q(\nu)$  az emissziós kvantumspektrumot,  $k(2\nu_0 - \nu)$  az abszorpciós spektrumot,  $\nu$  a frekvenciát,  $\nu_0$  a tükrörfrekvenciát jelöli. A tükrörszimmetria-szabályt is sokoldalúan tanulmányozták már ([1] 108. old.). A legutóbbi időben *Kawski* és *Polacka* [4] a tükrörszimmetria-szabálytól való kisebb-nagyobb eltérést a fluoreszkáló részecske és a környezete közötti kölcsönhatással hozták kapcsolatba.

Mind a Stokes-féle szabály, mind a tükrörszimmetria-szabály részletesebb tanulmányozása tehát nem csupán a lumineszcenciára képes részecskék szerkezetének a közelebbi megismeréséhez vezet el, hanem ráirányítja a figyelmet a részecskék és a környezetük közötti kölcsönhatás közelebbi vizsgálatára is.

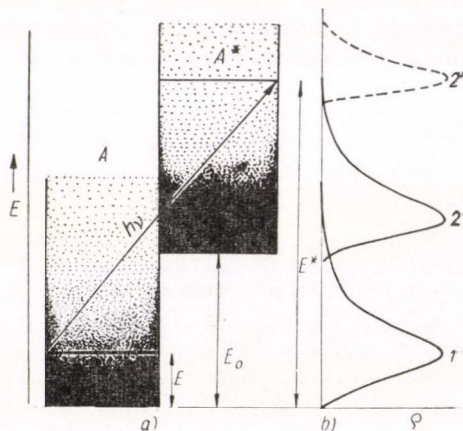
Az utóbbi időben *Sztyepanov* [5] klasszikus úton az abszorpciós és emissziós színeképek között újabb összefüggést talált, amely a fent említett szabályokban foglaltaktól lényegesen eltérő törvényszerűséget állapít meg, és már eddigi tanulmányozása is igen érdekes eredményekre vezetett. A Sztyepanov-féle összefüggés elsősorban a lumineszkáló részecskék jellemzőiről ad felvilágosítást, de a részletesebb vizsgálatok a környezettel való kölcsönhatás jelentős szerepére ezúttal is rámutatnak. Különös jelentőséget ad a Sztyepanov-féle összefüggésnek az a körülmény, hogy azt Sztyepanov általánosnak, tehát szilárd, folyékony és gáznemű rendszerekre egyaránt érvényesnek tartja.

A jelen dolgozatban összefoglaló képet kívánunk nyújtani a Sztyepanov-relációval kapcsolatos eddigi, különösen az oldatok fluoreszcenciájával kapcsolatos vizsgálatokról, de ismertetjük a szilárd és gáz rendszereken végzett kutatások eredményeit is. Az ismertetés során a szegedi Lumineszcencia és Félvezető Akadémiai Kutatócsoportban elért e tárgyú eredményekről is beszámolunk, közöttük olyanokról is, amelyek ezúttal először kerülnek közlésre.

### 1. §. A Sztyepanov-féle összefüggés és kísérleti ellenőrzése

A sokatomos, bonyolult molekulák termsémáját az 1/a. ábra helyett jobban kifejezi a 2/a. ábra, ahol az  $A$  elektron-alapállapot és  $A^*$  gerjesztett állapot  $E$  és  $E^*$  energiához tartozó rezgési nívói gyakorlatilag folytonosan töltik ki az ábrán bevonalkázott energiatartományt.  $E_0$  a tiszta elektronátmenethez tartozó energia. Fluoreszcenciára csupán az  $A \rightarrow A^*$  abszorpciós átmenet vezet (pl. az ábrán feltüntetett  $h\nu$  energiájú átmenet), az  $A$  állapotbeli rezgési átmenetek inaktívak a fluoreszcencia szempontjából. E séma alapján az abszorpció és emisszió folyamatait a következőképpen tekinthetjük át.

Szobahőmérsékleten, ha a lumineszcenciára képes molekulák a környezetükkel termodinamikai egyensúlyban vannak, gyakorlatilag minden molekula az  $A$  alapállapotban tartózkodik. Ilyenkor a molekuláknak az  $E$  vibrációs nívókon való eloszlását a rendszer  $T$  abszolút hőmérsékletéhez tartozó



$$\varrho(E) = c(T)g(E) \exp(-E/kT)$$

2. ábra



Boltzmann-féle eloszlásfüggvény adja meg. Ebben  $c(T)$  a normálási feltételekből meghatározható állandó,  $g(E)$  az  $E$  energianívó statisztikai súlya,  $k$  a Boltzmann-állandó. Ilyen eloszlásfüggvényt mutat a 2/b. ábra az alapállapotra (1 görbe) és gerjesztett állapotra (2 görbe).

Egy  $h\nu$  energiájú foton abszorpciója során a molekulák az  $A$  alapállapotból az  $A^*$  gerjesztett állapotba kerülnek. Azt várhatnók, hogy a molekuláknak a gerjesztett állapot rezgési nívóin való eloszlását a  $h\nu$  energia szabja meg, és így a gerjesztett állapotbeli eloszlásra a 2' eloszlási függvény lesz érvényes. Ha ez így lenne, az emissziós színeképnek a gerjesztő fény frekvenciájától függenie kellene. Mint-hogy azonban a tapasztalat szerint az emissziós színekép a gerjesztő fény frekvenciájától lényegesen nem függ, fel kell tételezni, hogy a gerjesztés és az emisszó közötti időben, a gerjesztett állapot közepes élettartamánál néhány nagyságrenddel rövidebb idő alatt, a gerjesztett molekulák a rezgési nívókon lényegében az alapállapotbeli eloszlás szerint rendeződnek el (2/b. ábra, 2 eloszlási függvény). A gerjesztő energia egy része eközben hővé alakul.

Sztyepanov [5] a következő megfontolásokból indult ki. a) A fluoreszcenciaképes molekulák mind az alapállapotban, mind a gerjesztett állapotban, a gerjesztett állapot átlagos élettartama alatt, a  $T$  hőmérsékletre tartozó eloszlási függvény szerint oszlanak meg a vibrációs szinteken. b) Az alapállapot rezgési szintjei közötti optikai átmenetek száma elhanyagolható az alapállapot és a gerjesztett állapot közötti átmenetekéhez képest. E feltételek teljesülése esetén a  $k(\nu)$  abszorpció és  $f_e(\nu)$  emissziós színeképek között fennáll a következő kapcsolat:

$$\frac{f_e(\nu)}{k(\nu)} = D(T) \nu^3 \exp(-h\nu/kT), \quad (2)$$

amelyben  $D(T)$  a  $\nu$  frekvenciától független állandó. A Kirchhoff-törvény felhasználásával Sztyepanov (2)-ből az

$$f_e(\nu) = D(T) \cdot k(\nu) \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{kT}} \equiv D(T) W_e^T(\nu) \quad (3)$$

összefüggéshez jutott, ahol  $W_e^T(\nu)$  az oldat hőmérsékleti sugárzási spektruma. A (2) összefüggés szerint tehát egy lumineszkáló rendszernél a lumineszcencia és a hőmérsékleti sugárzás azonos spektrális energiaeloszlást mutat. Mind (2), mind a (3) formula lehetőséget nyújtana az emissziós színeképnek számításra való meghatározására, kérdéses azonban, milyen mértékben teljesülnek ezek a formulák.

A (2) egyenletet oldatok fluoreszcenciájával kapcsolatban kísérletileg először Aljencev [6] ellenőrizte. Az ellenőrzés legegyszerűbb módja, ha az  $F(\nu) \equiv 3 \lg \nu - \lg [f_e(\nu)/k(\nu)]$  függvényt  $\nu$  függvényében ábrázoljuk, mivel (2) szerint az

$$F(\nu) \equiv 3 \lg \nu - \lg [f_e(\nu)/k(\nu)] = h\nu \lg e/kT + \text{konst} \quad (4)$$

összefüggésnek megfelelően ily módon egy egyenest kell nyernünk. A kapott egyenes meredekségét a  $T$  hőmérséklet szabja meg. Aljencev vizsgálatai szerint a (4) összefüggésben kifejeződő linearitás a tanulmányozott esetekben jó közelítéssel fennáll, de az egyenesek meredekségéből  $T^* > T$  hőmérséklet adódik, amint azt az 1. táblázatból is láthatjuk. A táblázat adatai szerint, az esetek jórésztében ezúttal is adódnak a  $T \approx 300^\circ \text{K}$  helyett  $T = 500 - 600^\circ \text{K}$  hőmérsékletek. A  $T^* > T$  tapasztalatot Aljencev [6] úgy értelmezte, hogy az elnyelt energiának egy része, a



fent említett Sztjepanov-féle *a*) feltétellel ellentétben a gerjesztett állapotban a molekuláknak a  $T^* > T$  hőmérséklet szerinti eloszlását hozza létre, mivel ennek az energiának a környezetbe való vándorlása a gerjesztett állapot átlagos időtartama alatt nem megy teljesen végbe. Ez *Aljencev* szerint másképpen azt jelenti, hogy a (2)–(4) formulák akkor tekinthetők érvényeseknek, ha azokban  $T$  helyett  $T^* > T$  hőmérséklet szerepel.

*Aljencev és Pahomücsseva* [7] fluoreszcien oldatokon végzett mérésekből arra a felismerésre jutottak, hogy a (4) egyenlettel definiált  $F(v)$  függvényt megadó egyenes meredekségére nagy befolyása van annak, hogy a (4)-nél az  $f_e(v)$  emissziós spektrumban a *reabszorpció hatását* figyelembe vesszük-e. A reabszorpcióra korrigált  $f_e(v)$  alapján (4)-ből  $T^* \approx T$  adódik és ebből azt a következtetést vonták le, hogy ennél az oldatnál a Sztjepanov-féle *a*) feltétel teljesül.

*Aljencev és Pahomücsseva* [8] további kísérleteik során az eritrozin vizes és acetonos, valamint fluoreszcien kénsavas vizes és nátriumhidroxidos vizes oldatainál vizsgálták meg a (2) formula érvényességét. Vizsgálataik alapján a szerzők arra a következtetésre jutottak, hogy  $\Delta T > 0$  abban az esetben, ha az oldatban nemcsak egyfajta abszorbeáló (és esetleg fluoreszkáló) részecske van, hanem több (pl. ionizált forma, vagy dimérek és monomérek). E magyarázat szerint tehát a  $T^* > T$  tapasztalati eredmény nem molekulán belüli, ill. molekulák közötti kölcsönhatással függ össze, hanem bizonyos értelemben „külsődleges” okkal. *Kravcov és Rubinov* [9] már azt is megkísérelték, hogy a  $\Delta T$  és az oldatban jelenlevő idegen anyagok valamely  $c$  koncentrációjához tartozó  $k(v)$  abszorpciós együtthatója között olyan kapcsolatot állítsanak fel, amelyből a  $c$  meghatározható. Az általuk tanulmányozott két oldatnál azonban a (2) összefüggés nem volt teljes bizonyossággal alkalmazható és ezért kétségesnek látszik, hogy a nyert eredményeik valóságos törvényszerűségeket tükröznek-e.

A (2) egyenlet érvényességét *gázok fluoreszcenciájával* kapcsolatban is több esetben megvizsgálták. *Nyeporent* [10] már korábban kimutatta, hogy gőzöknél a gerjesztett molekuláknak a vibrációs szinteken való eloszlása a gerjesztett állapot élettartama alatt nem valósul meg a kísérleti hőmérsékleten, hanem az eloszlás a gerjesztő kvantumok energiájától függően valamely magasabb  $T^*$  hőmérsékletnek megfelelő lesz. Ugyanekkor a fluoreszcenciaspektrum, a kvantumhatásfok és a gerjesztett állapot élettartama is a gerjesztő fény frekvenciájától függ. Ezeket a viszonyokat újabban a (2) egyenlet érvényességének tanulmányozása során *Boriszevics, Tolkacsev és Gruzinszkij* számos gőz-rendszerrel megvizsgálták. A *Boriszevics és Gruzinszkij* [11] munkájából átvett 3. ábrán 2 és 3 a  $\beta$ -naftilamin abszorpciós és emissziós spektrumát, 1 pedig a  $\Delta t(\bar{\nu}_{\text{ger}})$  függvényt jelöli.  $\Delta T \approx 0$  a  $\nu_0$  tiszta elektronátmeneti hullámszám közelében, e fölött  $\Delta T > 0$ , ez alatt  $\Delta T < 0$  eset is meg-

1. TÁBLÁZAT

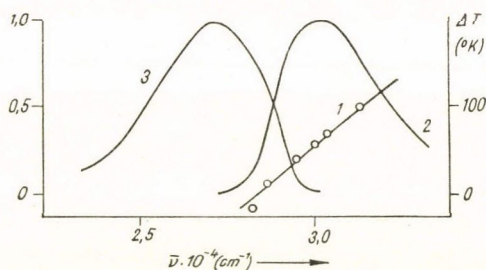
Megnevezés	$T^*(^{\circ}\text{K})$	$T^* - T$
Eozin extra		
vízben	385	92
amilalkoholban	375	82
acetonban	520	227
Eritrozin extra		
vízben	614	321
acetonban	644	351
víz + acetonban.	604	311
Rodamin 6 G extra		
vízben	447	154
acetonban	353	60



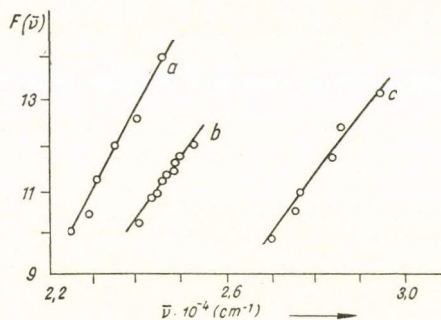
figyelhető volt. Az utóbbi esetben, amikor  $\bar{\nu}_{\text{gerj}} < \nu_0$ , a gerjesztő foton energiájához a molekulák vibrációs energiája egy részének hozzá kellett adódnia, csakis így gondolható el a 2/a ábra szerinti sémában a gerjesztés lehetősége. [11] szerint az 1 egyenesből a tiszta elektronátmeneti frekvencia jól meghatározható pl. perilénél és antracénél is. Tolkacsev és Boriszevics [12] 1-aminoantrakinon és három különböző ftálimidszármazék gőzeinél, Boriszevics és Gruzinszkij [13], ill. Gruzinszkij és Boriszevics [14] pedig néhány további aromás vegyület gőzeinél állapították meg a (2) összefüggés érvényességét. Az utóbbi két dolgozatban a szerzők rámutatnak arra, hogy a  $T^*$  meghatározásánál helyesebben járunk el, ha a (2)-ből adódó hőmérsékletet „nulladik közelítésű”  $T_0^*$ -nak tekintjük, e  $T^*$  hőmérsékleten mérjük meg  $k(\nu)$ -t, és  $k(\nu)$ -vel (2)-ből az első közelítésű  $T_1^*$ -ot kapjuk, majd az eljárás folytatása útján a valódi  $T^*$ -ot. Oldatoknál már a  $T_0^*$  közel egyenlő  $T^*$ -gal, mivel oldatoknál a  $k(\nu)$  általában kevésbé függ a hőmérséklettől. A [12] munkában a szerzők megállapítják

azt is, hogy a  $\Delta T(\bar{\nu}_{\text{gerj}})$  függvény alapján a fluoreszkáló molekulák  $c_{\text{rezg}}$  rezgési hőkapacitását meg lehet határozni a

$$\Delta T = \frac{\bar{\nu}_{\text{gerj}} - \nu_0}{c_{\text{rezg}}} \quad (5)$$



3. ábra



4. ábra

összefüggésből ( $\text{cm}^{-1}/\text{fok}$  egységekben). Az így nyert rezgési hőkapacitás (ill. rezgési fajhő) értékek jól egyeztek más módszerekkel meghatározott értékekkel. Hasonló vizsgálatokról számol be Boriszevics [15] legújabb munkájában is: perilén, antracén és néhány ftálimid származék rezgési fajhőjét adja meg az (5) egyenlet alapján. A nyert  $c_{\text{rezg}} = 0,16 - 0,50 \text{ cal/g} \cdot \text{fok}$  közé eső értékek korábbi — más eljárásokkal nyert — irodalmi értékekkel jól megegyeznek. A Sztjepanov-féle összefüggés gőzöknél való teljesülését igazolják Boriszevicsnek és munkatársainak [16] további, két ftálimid-származékra vonatkozó vizsgálatai is; e kutatások során oldatokat is tanulmányoztak. A [15] és [16] dolgozatokban foglalkoznak azzal a problémával is, hogy az antistokesi gerjesztés esetén a (2) egyenletből mutató eltéréseknek

mi lehet az oka. Stevens [48] azt a kérdést tanulmányozta, hogy az (5) összefüggésnek megfelelő  $\Delta E = h(\nu_{\text{gerj}} - \nu_0)$  energia milyen módon adódik át a gerjesztett  $\beta$ -naftilamin molekulákról gázfázisú paraffin szénhidrogéneknek.

Míg folyadékoknál és gőzöknél széleskörűen tanulmányozták a Sztjepanov-féle összefüggést, szilárd rendszerekre a vizsgálatok ezideig alig terjedtek ki. Ennek egyik oka az, hogy a szilárd luminofórok jelentős részénél, így pl. azoknál, amelyek-



nél a világítás rekombinációs jellegű, a Sztjepanov-összefüggés érvényességéhez szükséges feltételek nem teljesülnek. *Rjzanova, Fagyjeva és Pavlina* [17] kristályos metafenildiamin, bracidinsav és adipinsav esetében a 4. ábrán bemutatott Sztjepanov-egyeneseket nyerték (az egyenesek  $a$ ,  $b$ ,  $c$  jelölése az anyagok előbbi felsorolásának felel meg). Az  $F(\nu)$  függvény ezekben az esetekben is lineáris. Mind-egyik egyenesből  $T^* > T$  adódott (átlagosan  $\Delta T > 50-80$  fok volt). Minthogy kristályos testeknél éppúgy  $\Delta T > 0$  értékeket kaptak, mint az oldatoknál, azt a következtetést vonták le, hogy a jelenség a lumineszkáló molekulák gerjesztett állapotának sajátos tulajdonságaival függ össze.

*Lendvay* [47] fluoreszcinnel aktivált  $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  rétegfoszforoknál az emissziós színeképek összetett szerkezetének értelmezésével kapcsolatban kísérlete meg a (2) egyenlet alkalmazását, oly módon, hogy az emissziós színeképet a lumineszkáló rendszer egyes centrumaira külön-külön érvényesnek elfogadott (2) egyenletekkel meghatározható emissziós színeképek szuperpozíciójaként tekintette. Az ilyen, különböző lumineszkáló centrumokkal bíró rendszereknél az egyes centrumokra a  $T_i^*$  vibrációs hőmérséklet általában különböző lehet, és  $T_i^*$  ismeretlen volta miatt a számítások nagy nehézségekre ütköznek.

A Sztjepanov-féle összefüggés az ismertetett kísérleti vizsgálatok szerint tehát mind szilárd, mind pedig folyékony és gőz állapotú fluoreszkáló rendszereknél lényegében teljesülni látszik, de néhány kérdés még nyitva marad: *a)* Az antistokesi gerjesztés tartományában rendszeresen eltérés mutatkozott az  $F(\nu)$  függvény linearitásától; kérdéses eme eltérés oka. A [15] és [16] dolgozatok szerint ez az eltérés szennyezéseknek tulajdonítható, de ez a kérdés szélesebb körű vizsgálatot igényel. *b)* Lehetséges-e, hogy kondenzált rendszereknél valóban  $T^* > T$  legyen? A [7] szerint ez feltételezhető, [8] szerint viszont nem. Hasonlóan tagadó választ adnak e kérdésre [16]-ban is. Ez a probléma is szélesebb körű vizsgálatot tesz szükségessé. A következőkben azokkal a vizsgálatokkal foglalkozunk, amelyek a most említett problémákkal kapcsolatosak.

## 2. §. A módosított Sztjepanov-féle összefüggés és kísérleti ellenőrzése

Amint korábban már utaltunk arra, *Sztjepanov* a (2) összefüggést egyetemes érvényességűnek tekintette, minthogy véleménye szerint az *a)* és *b)* feltételek bonyolult molekuláknál igen tág körben teljesülnek. Az előző pontban ismertetett kísérleti eredmények — legalábbis kvalitatíve — ezt az állítást, úgy látszik, igazolják is. Az a tapasztalat viszont, hogy a kvantumhatásfok az antistokesi frekvencia-tartományban ugyancsak esik, *Sztjepanov* [18] szerint arra vezethető vissza, hogy az alapállapot vibrációs nívói között is létrejöhetnek optikai átmenetek, vagyis a *b)* feltétel még sem egyetemes érvényű. *Nyeporent* [19] kritikailag tárgyalva a Sztjepanov-féle megfontolásokat, a következő összefüggéshez jutott:

$$\frac{f_q(\nu)}{\varepsilon(\nu)} = 1,068 \cdot 10^{-40} \frac{\nu^2 \tau}{\eta_m} \exp[-h(\nu - \nu_0)/kT], \quad (6)$$

ahol  $f_q(\nu)$  a normált emissziós kvantumspektrum,  $\varepsilon(\nu)$  a moláris dekadikus extinkciós koefficiens,  $\eta_m$  a kvantumhatásfok maximális értéke,  $\tau$  a fluoreszcencia csillapodási ideje ( $\tau$  s-ban,  $\nu$  s<sup>-1</sup>-ben mérve).



*Ketskemény, Dombi és Horvai* [20] kimutatták, hogy mind a (2), mind a (6) összefüggés kiegészítésre és módosításra szorul. Számításaik szerint (2) helyett az

$$\frac{f_e(v)}{k(v)} = D' \eta^*(v) n^2(v) v^3 \exp(-hv/kT) \quad (7)$$

egyenletet — a módosított Sztjepanov-féle összefüggést — lehet általánosabb érvényűnek tekinteni. Itt  $D'$  egy frekvenciától független állandó,  $\eta^*(v)$  és  $n(v)$  pedig a relatív kvantumhatásfok és a törésmutató. Ha  $\eta^*(v) \equiv$  állandó és  $n(v) \equiv$  állandó, akkor a (7) egyenlet átmegy (2)-be. A (2) egyenlet módosítását nemcsak az tette szükségessé, hogy az antistokesi gerjesztési tartományban a (2) egyenlet a kísérletek tanúsága szerint nem teljesült kielégítően, hanem az a felismerés is, hogy a Sztjepanov-féle *a*) és *b*) feltételek bizonyos esetekben nem bizonyulnak elégségeseknek. Így pl. *Ketskemény* [21] keverékoldatoknál kimutatta, hogy az emissziós színek jelentősen függhet a koncentrációtól, jöllehet az *a*) és *b*) feltételek teljesülnek külön-külön mindegyik komponensre. *Ketskemény és munkatársai* [20] ilyen megfontolások alapján egészítették ki az említett feltételeket néhány továbbiával, amelyek közül a leglényegesebb, hogy a (2) egyenlet érvényességének feltételéül kell tekinteni azt is, hogy a *fluoreszcenciaemisszió aktusai az aktív abszorpciós átmenetek inverzei* legyenek. Ebből kiindulva lehet a (7) egyenlethez jutni. Ha a feltételek kiegészülnek még azzal is, hogy a molekulák energiaszintjeinek függvényeinek az alakja is megegyezzik az alapállapotban és a gerjesztett állapotban, akkor a (6) alatti Nyeporent-féle összefüggés is módosul:

$$\frac{f_q(v)}{\varepsilon(v)} = 1,068 \cdot 10^{-40} \frac{n^2 v^2 \eta(v) \tau}{\eta_m^2} \exp[-h(v - v_0)/kT]; \quad (8)$$

ez az egyenlet, ha a törésmutató  $n=1$  és a hatásfok  $\eta(v) \equiv \eta$  lenne, átmenne az eredeti (6) összefüggésbe.

*Ketskemény, Dombi és Horvai* [20] szerint a Sztjepanov-féle (3) összefüggés is módosításra szorul. Számításaik szerint a Kirchhoff törvény alapján a  $W_q^T(v)$  hőmérsékleti sugárzási kvantumspektrumra érvényes

$$W_q^T(v) = \text{const} \cdot \varepsilon(v) v^4 \exp(-hv/kT) \quad (9)$$

kifejezésből, (3) helyett az

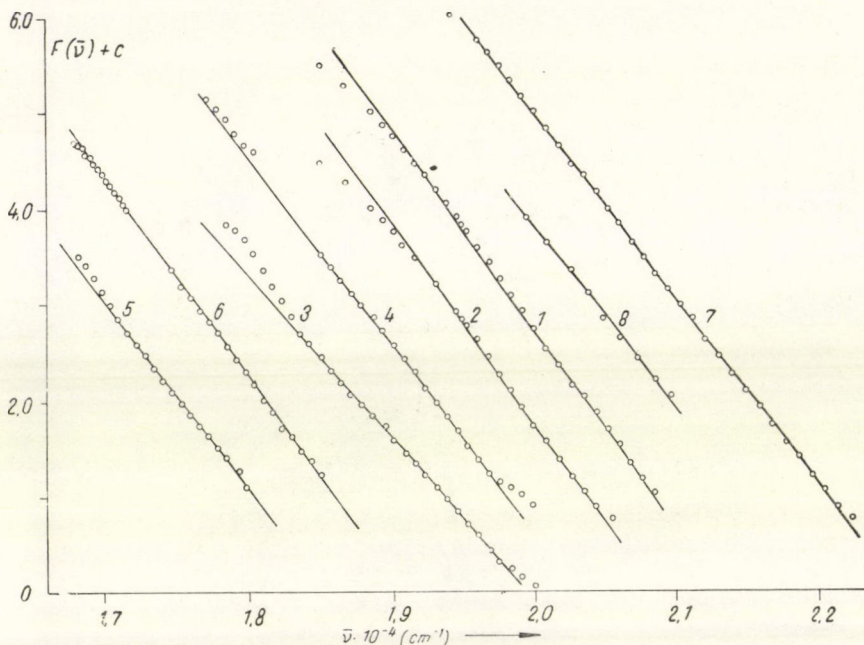
$$f_q(v) = D'' \eta(v) W_q^T(v), \quad (10)$$

összefüggés adódik, amelyben  $D''$  a  $v$  frekvenciától független állandó. Eszerint — a megfelelő feltételek teljesülése mellett — az  $\eta(\lambda)$  kvantumhatásfokfüggvény a lumineszcenciaspektrum és a hőmérsékleti sugárzási spektrum hányadosával arányos, és ellentétben a (3) egyenlettel, e két spektrum általában nem azonos lefutású.

A (7), ill. (10) összefüggés érvényességét *oldatok* fluoreszcenciájára vonatkozólag sok rendszernél tanulmányozták. [20]-ban fluoreszcein, rodamin B, eozin és tripaflavin vizes, ill. etilalkoholos oldatainál, adalékanyaggal (pl. HCl, NaOH hozzáadásával) és anélkül, egyes esetekben több gerjesztő frekvencia mellett is megállapították, hogy gyakorlatilag a teljes, kísérletileg hozzáférhető átfedési tartományban igen nagy pontossággal teljesül a (7) egyenlet, míg a (2) egyenlet az antistokesi gerjesztés tartományában általában nem bizonyult érvényesnek. A [20]-



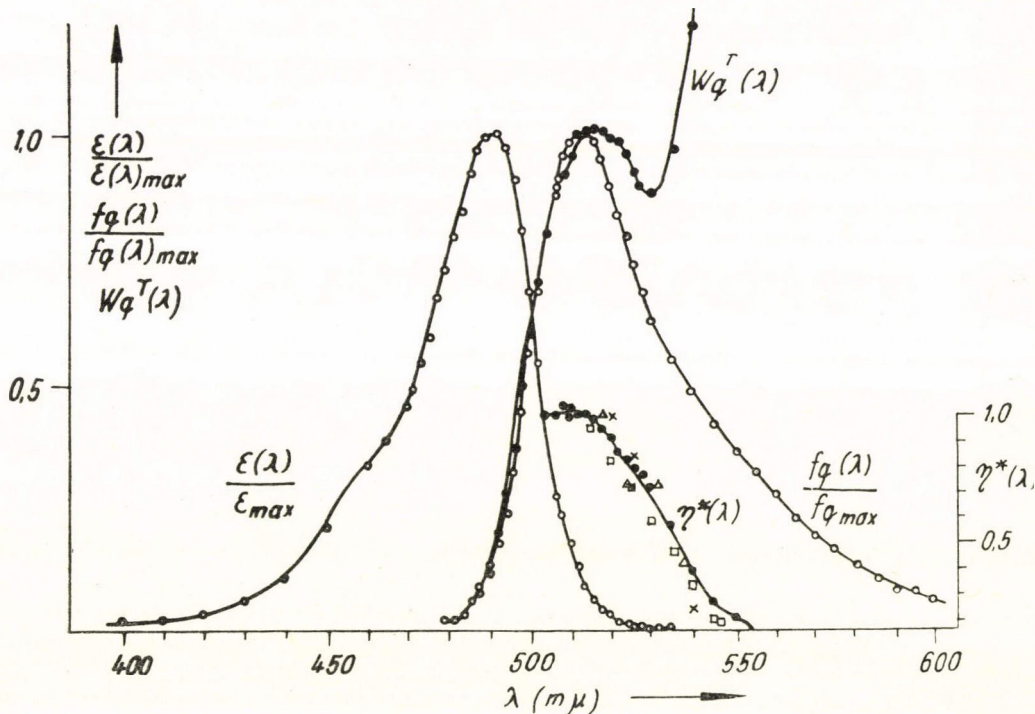
ból vett 5. ábra néhány példát mutat (1-tripaflavin, 2-fluoreszcein,  $\lambda_g=436\text{ m}\mu$ ; 3-fluoreszcein,  $\lambda_g=460\text{ m}\mu$ ; 4-eozin,  $\lambda_g=436\text{ m}\mu$ ) a (2) egyenlettől való eltérése. Az egyenesek hajlásszögéből számított  $T^*$  hőmérséklet fluorezceinnél  $T^* \approx T = 298 \pm 2^\circ\text{K}$  a  $\lambda_g$ -tól függetlenül. A többi anyagnál  $T^* > T$ , és amellet  $T^*$  a ger-



5. ábra

jesztő fény hullámhosszának növelésével csökken. [20]-ban a  $T^* > T$  tapasztalatot — *Aljencev* [6] értelmezési módjával egybehangzóan — a *Sztyepanov-féle a)* fel-tétel megsértésének tulajdonítják. Eszerint a  $T^*$  azért nagyobb  $T$ -nél, mert a  $v_g$  viszonylag nagy a  $v_0$ -hoz képest, és így a gerjesztett molekulák „magasabb hőmér-sékletűek”, mint a környezetük. A (2) és (7) összefüggések érvényességének viz-sgálata során az  $F(v)$  függvények menetének tanulmányozása nem mutatja eléggé szemléletesen a (2) és (7) egyenletek eltérését, mert hiszen az 5. ábrán látható, hogy a (2) egyenlet is eléggé nagy frekvenciaintervallumban teljesül. Ha azonban a (3) és (10) egyenleteket hasonlítjuk össze, az eltérések igen szemléletesen megmutatkoznak. A 6. ábrán ([20] alapján, hullámhossz-függvényben) önkényes egységekben fel-tüntetjük az  $\varepsilon(\lambda)$  abszorpciós színeképet, az  $f_q(\lambda)$  emissziós kvantumszíneképet és a  $W_q^T(\lambda)$  hőmérsékleti sugárzási színeképet, valamint a (10) egyenlet alapján kiszámított  $\eta(\lambda)$  hatásfokfüggvényt fluorezceinnél. A (10)-ből számított hatásfokok igen jól egyeznek a *Vavilov* [22], *Jabłoński* [23] és *Tumerman* [24] méréseiből nyert hatásfokok-kal. A 6. ábrából az is kitűnik, hogy az  $f_q(\lambda)$  és  $W_q^T(\lambda)$  — ellentétben a (3) egyenlettel — nem arányosak, csupán egy viszonylag keskeny spektrum tartományban. Ez vi-lágosan mutatja, hogy a (10) egyenlet érvényes, és eszerint egyúttal a (7) alatti mó-dosított *Sztyepanov-féle* összefüggés érvényessége is igazolást nyert.

A módosított Sztjepanov-féle összefüggésnek az oldatok esetében tapasztalt érvényessége arra enged következtetni, hogy az 1. §. végén megfogalmazott *a)* kérdésre választ nyertünk: az  $F(v)$  függvénynek a linearitástól való eltérése az antistokesi gerjesztési tartományban annak tulajdonítható, hogy az eredeti (2) Sztje-



6. ábra

panov-féle összefüggésben az  $\eta(v)$  hatásfokfüggvény — amely az antistokesi tartományban az eddigi tapasztalatok szerint nem állandó — nem szerepel. Az a további kérdés, hogy az  $\eta(v)$  hatásfokfüggvénynek az antistokesi tartományban való csökkenése szennyezésekre vezethető-e vissza, vagy pedig az alapállapot vibrációs szintjei közötti optikai átmenetekre, ill. egyes rendszereknél az előbbi, másoknál esetleg az utóbbi okra, még részletesebb vizsgálatokat igényel.

Az 1. §. végén megfogalmazott *b)* kérdésre adandó válasszal kapcsolatban néhány problémát a következő pontban vetünk fel.

### 3. §. Újabb vizsgálatok az oldatok abszorpciós és fluoreszcencia-spektrumai közötti kapcsolatáról

Részint a Sztjepanov-féle összefüggés érvényességi körének megállapítása céljából, részint annak tüzetesebb tanulmányozására, hogy kondenzált rendszerekben feltételezhető-e a gerjesztett állapot átlagos élettartama alatt az oldat  $T$  hőmérsék-



letének megfelelő eloszlás a vibrációs nivókon, számos folyékony fluoreszkáló rendszert megvizsgáltunk. Ezeknél szisztematikusan változtattuk a közeget (a viszkozitás megfelelő megválasztása útján), a fluoreszkáló molekulák átlagos élettartamát (kioltóanyag adagolása útján), a gerjesztő fény hullámhosszát és az oldott fluoreszkáló anyagot (oly módon, hogy az abszorpció és emissziós színeképek rendre tolódjanak el a nagyobb hullámhosszak felé).

a) *Összefüggés a fluoreszcencia-színkép, a hőmérsékleti sugárzási színkép és a kvantumhatásfok-függvény között.*

Kozma [25] olyan fluoreszkáló oldatokat tanulmányozott, amelyeknél a fluoreszcencia-spektrumnak a látható színkép területére eső  $\lambda_{e, \max}$  maximumhelye szisztematikusan tolódik a színkép vörös vége felé, és megkísérelt kapcsolatot találni a  $\lambda_{e, \max}$ , az  $\eta(\lambda)_{\max}$  (az abszolút kvantumhatásfok maximuma) és a (2), ill. (7) egyenletekkel meghatározott  $T^*$  között. Eredményeit a 2. táblázatban foglalkuk össze (a fluoreszkáló anyag koncentrációja mindegyik oldatnál  $5 \cdot 10^{-5}$  mol/l,

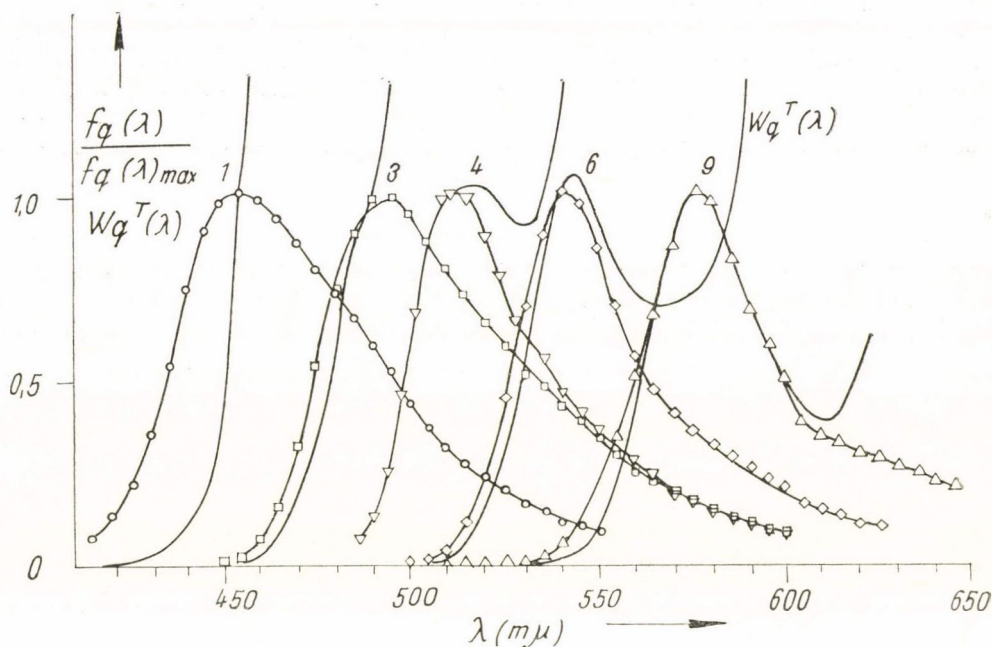
2. TÁBLÁZAT

Sorszám	Megnevezés	$\lambda_g$ (m $\mu$ )	$\lambda_{e, \max}$ (m $\mu$ )	$T^*$ (°K)	$\Delta T$ (°K)	$\eta(\lambda)_{\max}$
1	Eszkulin	409	455	325	27	0,98
2	Al-morin	420	495	329	31	0,97
3	Tripaflavin	436	493	344	46	0,70
4	Fluoreszcein	475	512	316	18	0,93
5	Rodulin o.	513	520	321	23	0,81
6	Eozin	530	542	350	52	0,93
7	Bengáli v.	546	567	395	97	0,30
8	Rodamin B.	546	576	328	30	0,57

az oldószer víz, ill. etilalkohol volt, az oldatok egyes esetekben adalékanyagot is tartalmaztak, pl. nátriumhidroxidot, sósavat, vagy ecetsavat; valamennyi esetben  $T = 298 \pm 2$  °K volt). A táblázatból kitűnik, hogy az említett mennyiségek között nincsen egyértelmű kapcsolat. Annál érdekesebb kapcsolat adódott a (10) egyenlet érvényességének vizsgálata során. A 7. ábrán feltüntettük az  $f_q(\lambda)$  emissziós kvantum-spektrumokat és a (9) egyenletből számított  $W_q^T(\lambda)$  hőmérsékleti sugárzási spektrumokat. Az utóbbi spektrumokat úgy normáltuk, hogy a rövidhullámú szakaszon együtt fussanak a fluoreszcencia-spektrumokkal (ez elérhető, ha a fluoreszcencia-maximum helyén a hőmérsékleti sugárzási spektrumot úgy választjuk meg, hogy  $W_q^T(\lambda_{e, \max}) = f_q(\lambda_{e, \max})$  legyen). Az egyes görbék számozása a 2. táblázat sorszámainak megfelelő. Az ábrából látszik, hogy az  $f_q(\lambda)$  és  $W_q^T(\lambda)$  függvények menete annál jobban megegyezik, minél hosszabb hullámoknál van a lumineszcencia-spektrum maximuma. Ez egyúttal a (10) egyenlet alapján azt is jelenti, hogy az  $\eta(\lambda)$  hatásfokfüggvény a rövidhullámú színekterületen emittáló anyagoknál viszonylag rövidebb hullámoknál kezd esni, mint a hosszúhullámú színekterületen emittáló anyagoknál. A  $W_q^T(\lambda)$  függvénynek az  $f_q(\lambda)$ -któl a hosszúhullámú spektrumszakaszon való eltérése nyilvánvalóan arra vezethető vissza, hogy ebben a tartományban a (3) egyenlet nem érvényes, hanem a (10) egyenlet írja le a három spektrum közötti összefüggést. Ezt a következtetést egyébként fluoreszcein és tripaflavin oldatok



esetében *Ketskemény* és *munkatársai* [26] hatásfokmérési is alátámasztják. Megjegyezzük, hogy a  $T$  hőmérséklettel számított  $W_q^T(\lambda)$  függvények különösen a bengáli vörös és az eozin festéköldatainál az  $f_q(\lambda)$  függvényhez képest a hosszú hullámok felé tolódtak el, ha azonban a számítást  $T^*$  hőmérséklettel végezzük, akkor — a  $W_q^{T^*}(\lambda)$  függvényeknél — ez az eltolódás nem lép fel. Úgy látszik tehát, oldatoknál is szükséges bizonyos esetekben annak figyelembevétele, hogy az abszorpciós színkép, amely a  $W_q^T(\lambda)$  függvény meghatározásánál szerepet játszik, a hőmérséklettől kissé függ. (Gázoknál emiatt alkalmazták a [13] és [14] közleményekben a  $T^*$  meghatározásánál a szukcesszív approximációt.)

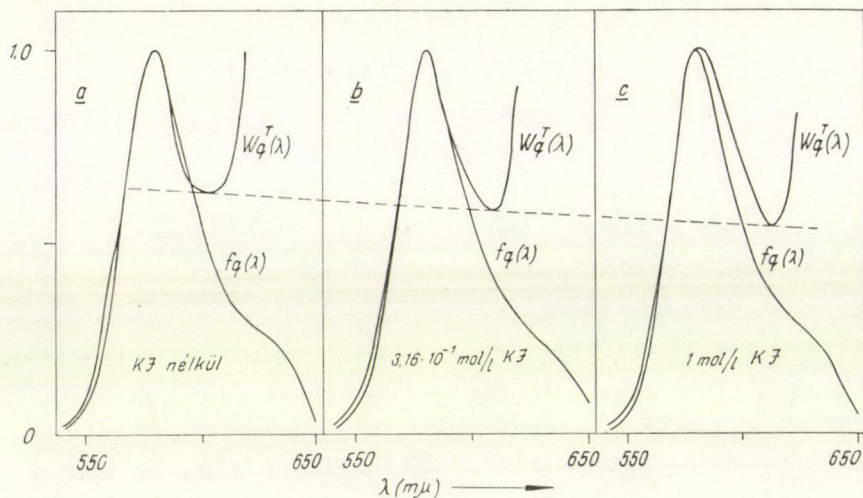


7. ábra

Említésre méltók a  $W_q^T(\lambda)$  függvénynek idegen anyaggal kioltott viszkózus oldatok fluoreszkálása esetében *Hevesi* [27] által tapasztalt változásai. A 8. ábra tetszőleges egységekben mutatja, hogy  $1 \cdot 10^{-4}$  mol/l koncentrációjú rodamin B glicerines-vizes oldatainál a káliumjodid kioltóanyag koncentrációjának növelésével (amelynek rendre az *a*, *b*, és *c* ábrák felelnek meg), az  $f_q(\lambda)$  és  $W_q^T(\lambda)$  függvények — amelyek kiszámításánál ugyanúgy jártunk el, mint a 7. ábrán feltüntetett  $W_q^T(\lambda)$  függvények esetében — egyre inkább megegyeznek. Az itt nem bemutatott fluoreszcein oldatok hasonlóan viselkednek. A fluoreszcein kevésbé viszkózus, tiszta vizes oldatainál azonban a  $W_q^T(\lambda)$  függvény menete kevésbé követi az  $f_q(\lambda)$  menetét, és a kioltószer koncentrációjának növelésével sem mutatkozik ilyen kifejezett változás. Ezek az eredmények — legalábbis kvalitatíve — összhangban vannak *Kozma* 7. ábrán bemutatott eredményeivel. A kioltószer koncentrációjának növelése ugyanis — a szóban forgó dinamikus kioltásnál — a gerjesztett állapot átlagos élettartamá-



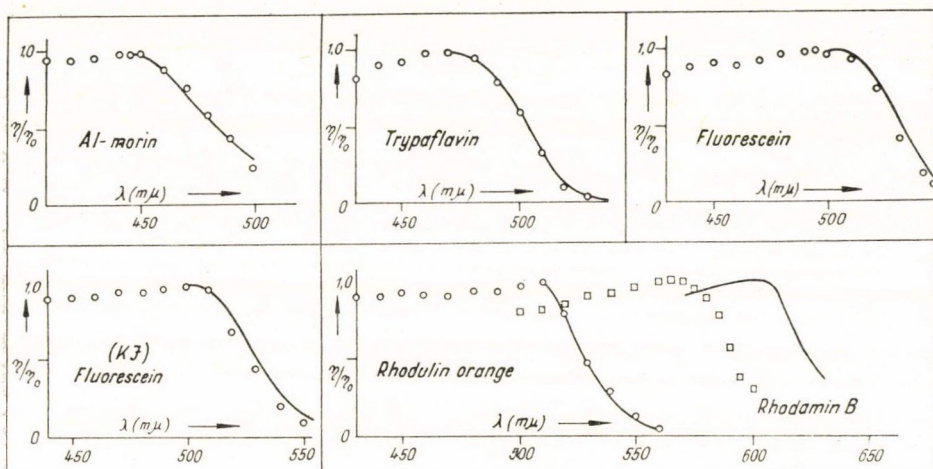
nak csökkenését okozza. Ez a csökkenés viszont azzal jár, hogy a gerjesztés befejezése után a molekuláknak a  $T$  „külső” hőmérsékletnek megfelelő eloszlása a vibrációs szinteken kevésbé következik be, és így ez az eloszlás egy magasabb  $T^*$  hőmérsékletnek fog megfelelni. Magasabb hőmérsékleten azonban [26] szerint az  $\eta(\lambda)$  hatásfokfüggvény a fluoreszcenciánál — és a tripaflavinnál is — kissé hosszabb hullámoknál kezd esni, és az esés kevésbé meredek. (Hasonlót tapasztaltak *Frackowiak* és munkatársai [28] is eozin glükózból való oldatánál is; itt a hőmérséklet



8. ábra

növelésével az  $\eta(\lambda)$  hosszabb hullámoknál bekövetkező esését asszociációs folyamatokkal hozzák kapcsolatba.) Ha a [6] és [20] munkákban kifejtett megfontolásokhoz csatlakozva a  $T^* > T$  hőmérsékletet valamely „effektív molekulahőmérsékletnek” vagy olyan „lokális hőmérsékletnek” tekintjük, amely a gerjesztett molekulák környezetében a kisugárzás pillanatában ténylegesen fennáll, akkor a kioltott oldatoknál a 8. ábrán bemutatott jelenség oka ugyanaz, mint a 7. ábrán bemutatott jelensége: az  $\eta(\lambda)$  kvantumhatásfok függvény esésének a megfelelő tényezők hatására a hosszú hullámok felé bekövetkező fokozatos eltolódása. Az a kérdés, hogy a kvantumhatásfok függvénynek ez az eltolása asszociációs folyamatokkal kapcsolatos-e, vagy egyéb okoknak tulajdonítható, csak további vizsgálatok alapján tisztázható.

*Kozma, Hevesi és Horvai* [44] további kísérleteket is végeztek a (10) egyenlet érvényességi körének a megállapítása céljából oly módon, hogy az  $\eta(\lambda)$  hatásfokot a [26]-ban leírt módszerrel megmérték, és összehasonlították a (10) egyenletből számított  $\eta(\lambda)$  értékkel. Az eredményeket a 9. ábrán mutatjuk be. Az ábrából kitűnik, hogy a látható színek kisebb hullámhosszúságú tartományában emittáló anyagok esetében a kétféle módon nyert  $\eta(\lambda)$  hatásfok értéke igen jól egyezik, a nagyobb hullámhosszúságú tartományban emittáló anyagoknál (így a rodamin B-nél) azonban jelentős eltérés mutatkozik. Az utóbbi eltérés közelebbi okát az idézett szerzők további kísérletek útján kívánják felderíteni.



9. ábra

Dombi, Ketskeméty és Kozma [45] a (7) módosított Sztjepanov-féle összefüggés és az (1) tükröszimmetria-szabály tanulmányozása alapján egy érdekes empirikus összefüggésre jutottak az abszorpciós és emissziós színek közötti kapcsolatot illetően. Mindenekelőtt arra a megállapításra jutottak, hogy az (1) tükröszimmetria-szabály módosításra szorul, nevezetesen a tükröszimmetria-reláció nem az  $f_q(v)$  fluoreszcenciaszínkép és a  $k(v)$  abszorpciós színkép, hanem az  $f_q(v)$  és az ún. *aktív elnyelés*  $k_{akt}(v) = \eta(v)k(v)$  spektruma közötti kapcsolatra vonatkozik, vagyis (1) helyett az

$$\frac{f_q(v)}{v^3} = \text{const} \frac{k_{akt}(2v_0 - v)}{2v_0 - v} \quad (11)$$

relációt adják meg. Itt  $\eta(v)$  a fluoreszcencia hatásfokát mint a gerjesztő fény frekvenciájának függvényét,  $v_0$  pedig az ún. *tükröfrekvenciát* jelöli. (11)-ből és (7)-ből

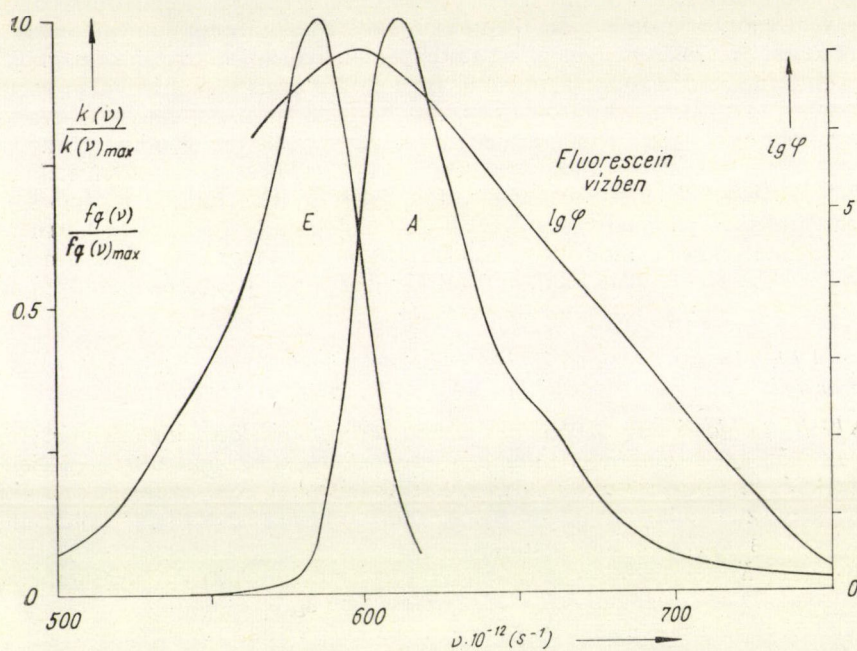
$$k_{akt}(v) = Av\varphi(v) \exp(hv/2kT), \quad \text{ill.} \quad f_q(v) = Bv^3\varphi(v) \exp(-hv/2kT), \quad (12)$$

ahol a  $\varphi(v)$  függvénynek a  $v_0$  frekvenciára vonatkoztatva tükröszimmetrikusnak kell lennie. A  $\varphi(v)$  függvény kísérleti meghatározása a (12) egyenletek alapján két fontos megállapításra vezetett: a)  $\varphi(v)$  csak akkor szimmetrikus, ha az aktív abszorpciós spektrumból számítjuk; b) a  $\varphi(v)$  függvény  $v_0$  tükröfrekvenciánál mutató maximumának helyéből  $v_0$  igen pontosan meghatározható. A 10. ábrán egy rendszerrel bemutatjuk a  $k_{akt}(v)$ ,  $f_q(v)$  és  $\lg \varphi(v)$  függvényeket. A  $\varphi(v)$  függvények menetének közelebbi vizsgálata azt mutatta, hogy jó közelítéssel  $\varphi = \text{const} \cdot \text{ch}^{-1} h(v - v_0)/kT$  alakban fejezhető ki. Eszerint a (12) egyenletek a következőképpen adhatók meg:

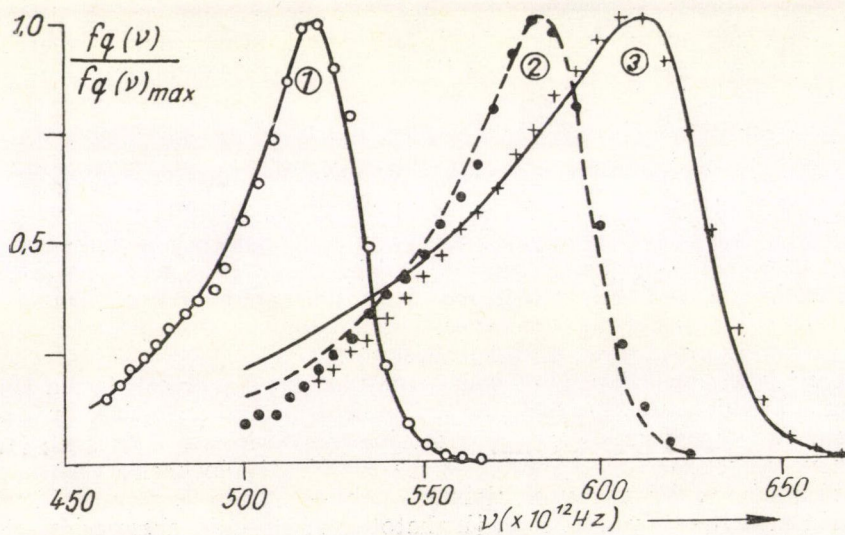
$$k_{akt}(v) = Av \cdot \text{ch}^{-1} h(v - v_0)/kT \exp(hv/2kT) \quad (13a)$$

$$f_q(v) = Bv^3 \cdot \text{ch}^{-1} h(v - v_0)/kT \exp(-hv/2kT) \quad (13b)$$





10. ábra



11. ábra



A (13b) egyenlet kísérleti ellenőrzése azt mutatta, hogy az  $f_q(v)$  emissziós színeképet ez az egyenlet jól leírja, de csupán akkor, ha  $T$  helyett a korábban már említett  $T^* \cong T$  hőmérsékletet vesszük, amelyet pl. az (5) egyenlet alapján határozunk meg. Példaként bemutatjuk a 11. ábrán a rodamin B, a fluoreszcsein és a tripaflavin esetében azt, hogy a (13b) szerint számított (folytonos vonallal kihúzott) emissziós kvantumspektrum mennyire közelíti meg a mértet. A (13a) egyenlettel számított abszorpciós színeképek a mértekkel hasonlóan jól egyeznek. A (13a) és (13b) egyenletek egyik jelentősége abban áll, hogy olyan bonyolult függvényeket, mint a  $k_{akt}(v)$  és  $f_q(v)$ , egyetlen empirikus paraméter segítségével állítanak elő. Természetesen olyan rendszereknél, amelyeknél a módosított, a (11) egyenlettel megadott tükrörszimmetriatörvény kevésbé pontosan teljesül, a  $v_0$ -tól távolodva a (13) egyenletekkel számított és a mért spektrumok egyre inkább eltérnek egymástól.

b) *A kioltásnak, a gerjesztő fény frekvenciájának és az oldószernek a hatása az abszorpciós és az emissziós színeképek kapcsolatára.*

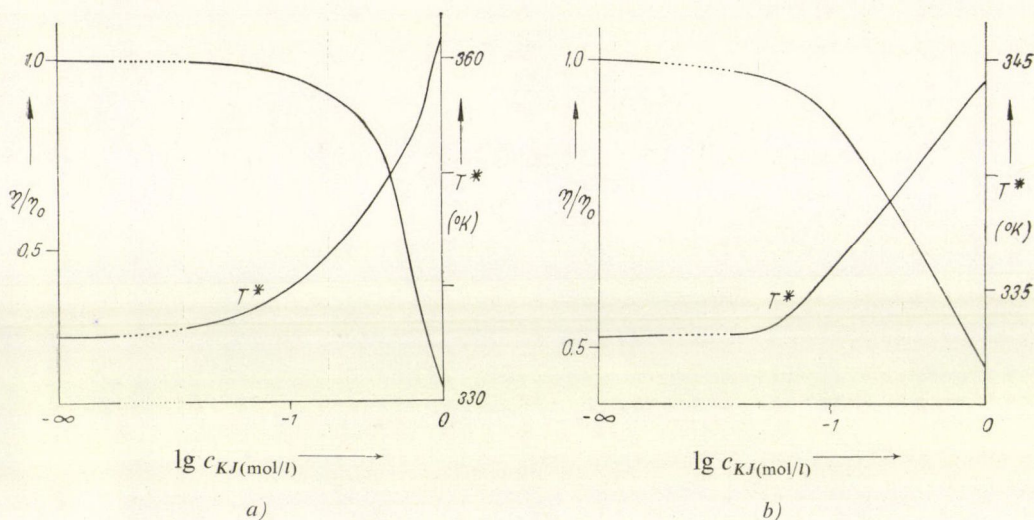
A kioltott oldatoknál a Sztjepanov-féle összefüggés részletesebb tanulmányozása, amint az már az előzőkből is kiténik, fontos adatokat szolgáltat a gerjesztett részecskék és a környezetük közötti kölcsönhatásról, mivel a dinamikus kioltás során a gerjesztett állapot átlagos élettartama csökken, és ezáltal a kölcsönhatás kifejlődésére is kevesebb idő marad.

Hevesi és Kozma [29], Kozma, Szalay és Hevesi [30] a (2) egyenlet alapján két kioltott rendszerrel meghatározták a  $T^*$ -értékeket, ügyelve arra, hogy a számításnál tekintetbevev frekvencia-tartományban az  $\eta(\lambda) \approx$  állandó legyen, azaz a (2)-ből és (7)-ből adódó  $T^*$  értékek megegyezzenek. Ezt el lehet érni, ha az  $F(v)$  függvénynek a (4) egyenlettel adódó lineáris szakaszát használjuk fel. (Egyébként glicerines fluoreszcsein oldatoknál pl. Galanyin [31] adatai alapján az  $\eta(\lambda)$  hatásfokfüggvény 495 m $\mu$ -tól 515 m $\mu$ -ig  $\pm 2,5\%$ -os hibával állandónak tekinthető.) Emellett a számításokhoz a szekundérfluoreszcencia spektrális hatásának kiküszöbölésével nyert emissziós színeképeket használtuk fel, a mérési eljárás részletei lényegében megegyeznek egy korábban publikált eljárásával (Ketskeméty és munkatársai [32]). A kioltott oldatok fluoreszcenciájának  $\eta/\eta_0$  relatív hatásfokát Ketskeméty és munkatársai [26] módszerével mértük. A Sztjepanov-féle összefüggés mindkét vizsgált rendszerrel igen jól teljesült, és a (4) egyenletből nyert egyenesek alapján jól meghatározott  $T^* > T (=298 \pm 2^\circ \text{K})$  értékek adódtak. Mind a fluoreszcsein, mind a rodamin B oldatok esetében káliumjodid kioltóanyagot használtunk, és az oldószer 60% glicerint, 3% nátriumhidroxidot, valamint vizet tartalmazott. A 12. ábra mutatja, hogy a  $T^*$  szabályosan növekszik a kioltóanyag  $c_{KJ}$  koncentrációjának növekedésével (az  $\eta/\eta_0$  csökkenésével). A jelenség a 3. §. a) pontjában megadott alapon értelmezhető: a gerjesztett állapot átlagos élettartamának a kioltással való csökkenése miatt a gerjesztett molekuláknak a környező közeggel való kölcsönhatása (termikus egyensúlya) nem fejlődhet ki.

Hevesi és Kozma [29] megvizsgálták a  $T^*$  változását egy olyan, részben kioltott fluoreszkáló rendszerrel, amelynél csupán a viszkozitás (a glicerín-víz elegy aránya) változott. Azt tapasztalták, hogy a viszkozitás növekedésével a  $T^*$  is növekszik. A  $T^*$  növekedését kapcsolatba hozták az abszorpciós színeképeknek a viszkozitással a hosszú hullámok felé való eltolódásával, amely — állandó  $\lambda_g$  gerjesztési hullámhosszúság mellett — olyan szerepet játszhatott, mint állandó abszorpciós színekép mellett a gerjesztő fény hullámhosszának a rövidebb hullámhosszak felé való eltolása.



Az utóbbi pedig Ketskemény és munkatársai [20] szerint is a  $T^*$  növekedését vonhatja maga után. E kérdés rendszeres tanulmányozása céljából, különös tekintettel arra, hogy gáz-rendszereknél — amint az 1. §-ban ismertettük — a  $T^*$  erősen függ  $\lambda_g$ -től, a gerjesztő fény hullámhosszának és a viszkozitásnak a függvényében részletesen megvizsgáltuk három folyékony rendszernél a  $T^*$  változását.



12. ábra

A gerjesztő fény hullámhosszának ( $\lambda_g$ ) és a közeg viszkozitásának változtatása mellett tripaflavin, rodulin oranzs és eozin etilalkoholos-glicerines oldatait vizsgáltuk, az oldatok mol/l-ben megadott koncentrációi  $2 \cdot 10^{-4}$ ,  $5 \cdot 10^{-5}$  és  $5 \cdot 10^{-5}$ , az adalékanyagok 2%-ecetsav,  $5 \cdot 10^{-3}$  mol/l sósav és  $5 \cdot 10^{-3}$  mol/l nátriumhidroxid voltak a festékek előbbi sorrendjének megfelelően.

A mérési eredményeket a 3–5. táblázatokban adjuk meg. A táblázatokban feltüntettük a közeg  $C_{\text{glic}}$  %-os glicerintartalmát, az abszorpciós és az emissziós színek  $\lambda_{a, \text{max}}$ , ill.  $\lambda_{e, \text{max}}$  maximumhelyeit, továbbá az abszorpciós koeficiensek  $k(\lambda)_{\text{max}}$  maximális értékeit is. Az eredmények azt mutatják, hogy a  $\Delta T = T^* - T$  különbség növekszik a gerjesztő fény  $\lambda_g$  hullámhosszának a csökkenésével, és konstans  $\lambda_g$  mellett jelentékenyen növekszik a közeg viszkozításával is, jóllehet az abszorpciós színek csupán igen kicsiny mértékben tolódnak el. A kísérletek tehát arra engednek következtetni, hogy a  $T^*$  nagyságának alakulásában mind a  $h(\nu_g - \nu_0)$  energiakülönbség, mind pedig a közeg viszkozitása szerepet játszik. A rodulin oranzs esetében a 13. ábrán bemutatjuk az abszorpciós és emissziós spektrumok egy részét is és a Sztjepanov-féle egyeneseket, amelyek a  $T^*$  meghatározására szolgáltak (az egyenesek megszerkesztésénél a legkisebb négyzetek módszerét használtuk, de az antistokesi területen az egyenesből kieső pontokat a szerkesztés során a fentebb mondottak miatt figyelmen kívül hagytuk). Az ábra jelölései a következők: 1 és 2 az alkoholos és a 90% glicerint tartalmazó oldat abszorpciós színeit jelölik, 1a és 2a pedig ugyanezeknél az oldatoknál a 460 m $\mu$  hullámhosszúságú fényvel gerjesztett emissziós színeképeket, 1b az alkoholos oldatnál az 555 m $\mu$

3. TÁBLÁZAT

(tripaflavin)

$C_{glic.}$ (%)	$T^*$ (°K)			$\lambda_{a, \max}$ (m $\mu$ )	$\lambda_{e, \max}$ (m $\mu$ )	$k(\lambda)_{\max}$ (cm $^{-1}$ )
	$\lambda_g$ (m $\mu$ )					
	436	455	475			
0	326	319	314	460	495	23,0
40	331	326	319	461	497	22,4
90	361	347	336	462	500	20,1

4. TÁBLÁZAT

(rodulin oranzs)

$C_{glic.}$ (%)	$T^*$ (°K)			$\lambda_a, \max$ (m $\mu$ )	$\lambda_e, \max$ (m $\mu$ )	$k(\lambda)_{\max}$ (cm $^{-1}$ )
	$\lambda_g$ (m $\mu$ )					
	460	480	510			
0	340	319	302	492	521	3,23
40	344	322	310	494	524	3,19
90	366	357	333	497	528	3,21

5. TÁBLÁZAT

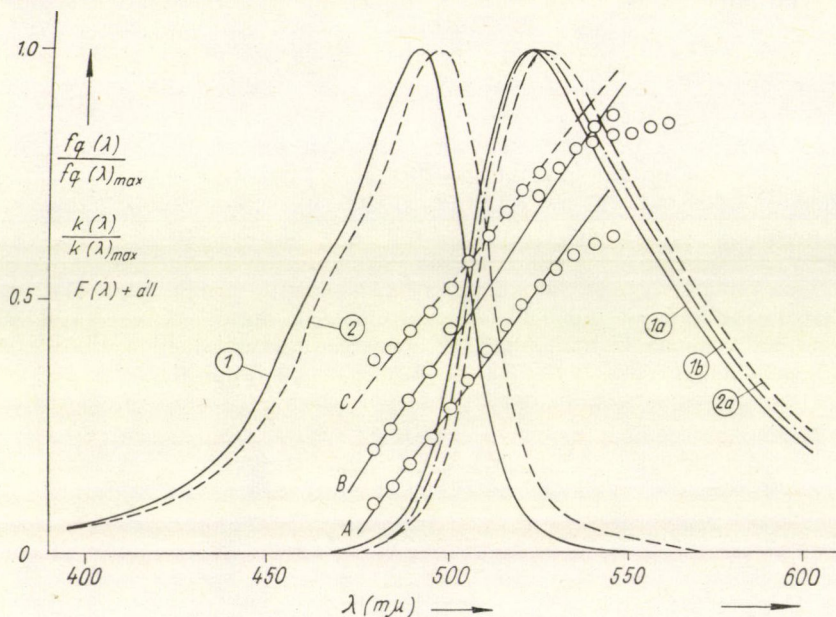
(eozin)

$C_{glic.}$ (%)	$T^*$ (°K)			$\lambda_a, \max$ ( $\mu$ )	$\lambda_e, \max$ ( $\mu$ )	$k(\lambda)_{\max}$ ( $cm^{-1}$ )
	$\lambda_g$ ( $\mu$ )					
	460	520	555			
0	340	326	314	522	540	11,4
40	345	331	322	522,5	543	11,4
90	364	347	334	523	545	10,4

hullámhosszúságú fénnel gerjesztett emissziós színeképet,  $A$ ,  $B$  és  $C$  pedig az összetartozó 1,  $1a$ ; 2,  $2a$ ; 1,  $1b$  abszorpciós és emissziós színeképek alapján a (4) egyenlet szerint nyert Sztjepanov-egyeneseiket. A 13. ábra mutatja, hogy a rodulin oranzsnál (de hasonlóan az itt nem bemutatott tripaflavinnál és eozinnál is) a fluoreszcencia-színkép kismértékben függ a gerjesztő fény hullámhosszától. Ez a függőség vagy arra vezethető vissza, hogy az oldatban több fajta, optikai tulajdonságaiban eltérő, lumineszcenciára képes részecske van, vagy pedig arra, hogy a gerjesztett állapotban a részecskéknél a környezetükkel való termikus egyensúlya nem alakulhatott ki. Ennek az alternatívának az eldöntése igen lényeges kérdés, mert hiszen ettől függ, hogy lehet-e lokális hőmérsékletről beszélni. A fluoreszcencia-spektrumnak a gerjesztő fény hullámhosszától való függéséről az irodalomban különböző vélemények találhatók (l. pl. egy rövid ismertetést *Kawski* [33] dolgozatában), amelyek alapján azonban nem lehetséges eldönteni, hogy az általunk tanulmányozott rendszereknél „szennyezések” vagy kölcsönhatások okozta frekvenciafüggésről van-e szó. Az eddigi vizsgálatokból kétségtelennek látszik, hogy mindkét



eset előfordulhat. A tripaflavinnál és kisebb mértékben a rodulin oranzsnál is a kromatográfiás analízis valóban két komponens jelenlétére mutatott, az ezinnál és a rodamin B-nél azonban, jóllehet ezeknél is jelentős  $\Delta T$  érték adódott a színképek alapján, második komponens jelenlétét nem lehetett észlelni. Ezek alapján úgy látszik, oldatokban is felléphet az a jelenség, amelyet gőzöknél kétséget kizáróan tapasztalni lehetett: a gerjesztett molekulák és a környezetük közti termikus egyensúly a gerjesztett állapot ideje alatt nem minden esetben alakulhat ki.



13. ábra

A közeg szerepét tanulmányozták Ketskemény, Szalay és Várkonyi [46] is. Méréseik során a (2) egyenlet érvényességét vizsgálták a tripaflavinnak az alkohol homológ sorba tartozó egyes alkoholokban való oldatainál. Azt találták, hogy a (2) egyenlet jól teljesül, de az abból adódó  $T^*$  hőmérséklet növekedik, ha oldószerként a homológ sor egyre magasabb tagját alkalmazzuk.

#### 4. §. A gerjesztett molekulák és a folyékony közeg közötti kölcsönhatásról

Az előzőekben mondtak alapján annyi mindenképpen bizonyos, hogy bonyolult molekulák esetén a  $h(\nu_g - \nu_0)$  energia a környezet hőmérsékleténél  $\Delta T$ -vel magasabb hőmérsékletre tartozó „molekulahőmérsékletet” okoz, és ez hőmérséklet gőzöknél a kisugárzás pillanatáig fennmarad, sőt az (5) egyenlet szerint a rezgési fajhő is kiszámítható a  $\Delta T$ -nek a (2) alapján való meghatározása után.

Folyadékoknál a fentiekben ismertetett kísérletek, amelyek az emissziós színképnek a gerjesztő fény frekvenciájával való változását mutatták ki, a Sztjepanov-



féle összefüggésnek egy  $T^* > T$  hőmérséklet tekintetbevételével adódó érvényességét állapították meg, továbbá a csillapodási időnek és a közeg viszkozitásának a  $\Delta T$ -re gyakorolt hatását is feltárták, azt igazolják, hogy folyadékoknál is fennállhat a kisugárzás pillanatában valamely  $T^* > T$  vibrációs hőmérséklet. Mivel azonban *folyadékoknál* a gerjesztett részecskék és a közeg részecskéi között a gőzállapothoz képest igen erős kölcsönhatás áll fenn, helyesebb a „vibrációs hőmérséklet” helyett valamely, a gerjesztett részecskéket a környező közeggel együtt magában foglaló mikrokörnyezeti „*lokális hőmérsékletről*” beszélni. E lokális hőmérséklet mindenestre kisebb, mint ugyanazon viszonyok mellett a gőzállapotban lenne, mivel a gerjesztés befejezése és a kisugárzás megkezdése közötti időszakaszban a gerjesztett részecskéknak a környező közeggel való kölcsönhatása semmiképpen sem hanyagolható el.

E kölcsönhatás természetéről, sőt közelebbi sajátosságairól is felvilágosítást nyerhetünk egyszerű termodinamikai megfontolások segítségével. Tekintsük a lumineszcenciára képes oldatot egy olyan termodinamikai rendszernek, amely a gerjesztett molekulákat magában foglaló  $T^*$  hőmérsékletű és a gerjesztett molekulákat körülvevő  $T \equiv T^*$  hőmérsékletű közeget tartalmazó alrendszerekből áll. Tegyük fel, hogy az alrendszerek nyitottak, tehát azok között termikus kölcsönhatás áll fenn. Mivel a gerjesztett molekulák száma elhanyagolhatóan kicsiny a közeg (az oldószer) molekuláinak számához képest, a közeget úgy tekinthetjük, mint valamely végtelen nagy hőkapacitású,  $T = \text{állandó}$  hőmérsékletű hőtartályt. Ha erre a rendszerre de Groot [34] megfontolásait alkalmazzuk, a következő összefüggést nyerjük:

$$\frac{d(T^* - T)}{dt} = -\frac{1}{\tau'} (T^* - T), \quad (14)$$

ahol  $\tau'$  a kölcsönhatási folyamat relaxációs ideje. (14)-ből

$$T^* - T = (T^* - T)_0 \exp(-\tau'/\tau). \quad (15)$$

Itt  $(T^* - T)_0$  az alrendszerek közötti hőmérsékletkülönbséget jelenti a  $t=0$  időben, a gerjesztés befejezésekor,  $T^* - T$  pedig az ugyanezek közötti hőmérsékletkülönbség a  $t=\tau$  időben, az emisszió pillanatában.

A (15) egyenlet szerint a  $\Delta T = T^* - T$  hőmérsékletkülönbségnek növekednie kell, ha

a) növeljük a gerjesztő frekvenciát, mivel ekkor a  $(T^* - T)_0$ -nak kell növekednie,

b) csökkentjük a gerjesztett állapot  $\tau$  átlagos élettartamát (pl. dinamikus kioltással),

c) növeljük a viszkozitást, mivel ekkor  $\tau'$  is növekszik; az utóbbi esetben hallgatólagosan feltettük, hogy az alrendszerek közötti kölcsönhatást a viszkozitás valóban befolyásolja.

Ezeket a következtetéseket a 3. §. b) pontjában ismertetett valamennyi kísérletünk megerősíti, és így a (15) egyenletnek a lumineszkáló oldatokra való alkalmazhatósága mellett szól. (15) érvényességének a kvantitatív vizsgálatát megnehezíti az a körülmény, hogy  $(T^* - T)_0$  kísérletileg nem határozható meg. Értékét megbecsülhetjük azonban, ha feltételezzük, hogy a  $h(\nu_g - \nu_{e, \max})$  gerjesztési energiatöbblet teljes egészében hővé alakul ( $\nu_g$  és  $\nu_{e, \max}$  a gerjesztő fény és az emissziós színekép



maximumához tartozó emittált fény frekvenciáját jelölik). Ebben az esetben

$$(T^* - T)_0 = \frac{k'h(v_g - v_{e,\max}) \cdot N}{Mc}, \quad (16)$$

ahol  $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ ,  $k' = 2,39 \cdot 10^{-8}$  cal/erg,  $h$ ,  $M$  és  $c$  pedig rendre a Planck-állandó, a fluoreszkáló részecske molsúlya és az oldott „gáz” rezgési fajhője. A (16) egyenlet lényegében ugyanazt fejezi ki, mint az (5) egyenlet, és a (16) felírásával csupán a fluoreszcenciára képes oldott molekuláknak a közeggel a *gerjesztés tartama* alatti kölcsönhatását hanyagoltuk el, amely — mivel a *gerjesztett állapot tartamánál* a gerjesztés tartama néhány nagyságrenddel rövidebb — bizonyára valóban elhanyagolható. Az általunk kapott kísérleti eredmények felhasználásával meggon-  
dolásaink kvantitatíve is beigazolódnak.

A *fluoreszeinnél*  $v_g = 6,89 \cdot 10^{14}$  s $^{-1}$ ,  $v_{e,\max} = 5,75 \cdot 10^{14}$  s $^{-1}$ ,  $M = 332$  g.  $c = 0,30$  cal/fok·g rezgési fajhővel (16)-ból  $(T^* - T)_0 = 100$  fok. Ezzel és Hevesi [35] fluorometrikusan mért  $\tau$  csillapodási idő adataival (ezek  $5,05 \cdot 10^{-9}$  s —  $2,39 \cdot 10^{-9}$  s értékek között változtak a kioltás folyamán) középértékben  $\tau' = 5,6 \cdot 10^{-9}$  s adódik. A *rodamin B-nél*  $v_g = 5,48 \cdot 10^{14}$  s $^{-1}$ ,  $v_{e,\max} = 5,17 \cdot 10^{14}$  s $^{-1}$ ,  $M = 479$  g. A  $c = 0,10$  cal/fok·g rezgési fajhővel (16)-ból  $(T^* - T)_0 \approx 70$  fok. Ezzel és a  $\tau' = 5,6 \cdot 10^{-9}$  s relaxációs idővel (amelyet, mivel a viszkozitás a két rendszernél megegyezett, a fluoreszeinnél nyert értékkel egyenlőnek vettünk) a kioltatlan oldatra  $\tau = 3,1 \cdot 10^{-9}$  s csillapodási idő adódott. Összehasonlításul megemlítjük, hogy Förster [36] monográfijában a *tiszta* glicerines kioltatlan rodamin B oldatra nézve  $\tau = 4,2 \cdot 10^{-9}$  s csillapodási idő szerepel, és McDuff [50] dielektromos relaxáció idő méréseiből az esetünkben használt glicerines-vizes közegnél mint extrapolált érték  $\tau' \approx 10^{-9}$  s-ra becsülhető. Végül Boriszevics [15] szerint néhány bonyolult molekulájú anyagnál a gőzfázisban  $c = 0,16 - 0,50$  cal/fok·g értékek között változik.

A többi vizsgált rendszernél, mivel mind a  $\tau$  csillapodási időre, mind a  $\tau'$  relaxációs időre vonatkozó adatok egyelőre hiányoznak, a (15) formula ellenőrzése nehézségekbe ütközik. Annyi azonban a két kioltott rendszer példája nyomán is látszik, hogy a gerjesztett részecskék és a közeg közötti kölcsönhatás ugyanolyan természetű gyenge termikus kölcsönhatás, mint amilyen a dielektromos relaxációs folyamatban szerepel. Ezt mutatja a (15) egyenletben szereplő relaxációs időnek a dielektromos relaxációs idővel való, legalábbis nagyságrendi egyezése.

Ha Jabłoński [37] nyomán az említett termikus kölcsönhatást egyszerűen hővezetésnek tekintjük, és a relaxációs időt

$$\tau' = \frac{q\rho c}{\lambda} \quad (17)$$

alakban vesszük fel — ahol  $q$  a gerjesztett részecskét körülvevő gömb felülete, amelyen a hő a gerjesztett állapot átlagos élettartama alatt a környezetbe továbbvívódik,  $\rho$ ,  $c$  és  $\lambda$  pedig a közeg sűrűsége, fajhője és hővezetőképessége —, akkor a  $\tau' = 5 \cdot 10^{-9}$  s,  $\rho = 1$  gcm $^{-3}$ ,  $\lambda = 5 \cdot 10^{-3}$  cal cm $^{-1}$  s $^{-1}$  fok $^{-1}$  és  $c = 0,8$  cal g $^{-1}$  fok $^{-1}$  értékekkel (17)-ből  $q \approx 3 \cdot 10^{-11}$  cm $^2$ , ill. a gömb sugara  $r \approx 1,5 \cdot 10^{-5}$  cm. Ez azt jelentené, hogy a lokális hő valójában nem „molekula-hőmérséklet”-ben, hanem egy — a gerjesztett részecskét körülvevő —  $10^{-5}$  cm nagyságrendű sugárral rendelkező mikrokörnyezet hőmérsékletében realizálnának. Ez az érték — bár kissé nagyknak látszik — fizikailag nem értelmetlen, mivel a fluoreszkáló anyag  $10^{-5}$  mol/l



koncentrációjánál, feltéve, hogy a fluoreszcenciára képes részecskék közül átlagosan minden ezredik van gerjesztett állapotban, a gerjesztett részecskék átlagos távolsága (az  $r^3 = 1/6 \cdot 10^{20} c$  formula alapján, ahol  $c$  a mol/l-ben mért koncentráció)  $r \approx 3 \cdot 10^{-4}$  cm lenne. Így azok a centrumok, amelyek körül a  $T^* > T$  hőmérsékletű mikrokörnyezet fennáll, viszonylag távoliak, és a mikrokörnyezetek maguk is kicsinyek a gerjesztett részecskék átlagos távolságához mérten.

A gerjesztett részecskék és a közeg közötti kölcsönhatásról alkotott fenti képnek az a lényeges vonása, hogy a folyadékokban sem áll be a termikus egyensúly a gerjesztett részecske és a közeg között, és hogy ez a körülmény a gerjesztett részecske környezetében a közeg hőmérsékleténél magasabb lokális hőmérséklet létezésére enged következtetni. Meg kell említenünk, hogy ez a gondolat nem újkeletű. Már Norman és Porter [38] felvetették, hogy az elektrongerjesztési energia feleslegének lokális hőként való megjelenése okozhatja szilárd rendszerekben a fotodisszociációs termékek translációs diffúzióját. Albrecht és Simpson [39] hasonló lokális hő megjelenését posztulálták a kondenzált rendszerekben fellépő rotációs diffúzió okaként. Albrecht ([40]–[41]) és újabban Jabłoński ([37] és [42]), ill. Lisicki [43] is foglalkozott az elektrongerjesztési energia-felesleg degradációjával poláros fénnnyel való gerjesztés esetén. Ezek a kérdések azonban már nem annyira az abszorpciós és emissziós színekkel, hanem a fluoreszcencia-polarizációval függnek össze, és ezért ismertetésük túllépné a jelen dolgozat kereteit.

### Befejező megjegyzések

A fentebb ismertetett, a lumineszkáló anyagok abszorpciós és emissziós színekepei között talált Sztjepanov-féle összefüggés részletesebb tanulmányozása a többi között a lumineszcencia-jellemzők közötti újabb kapcsolatok feltárására vezetett. Ilyenek a  $f_e(v)$  emissziós színekép, a  $k(v)$  abszorpciós színekép és az  $\eta^*(v)$  relatív hatásfok, ill. a  $\tau$  csillapodási idő között fennálló (7), ill. (8) összefüggések és a (11) egyenlettel kifejezett módosított tükröszimmetria szabály. E kapcsolatoknak a fluoreszkáló oldatoknál való tanulmányozása során kitűnt, hogy a gőzöknél a tiszta elektronátmeneti frekvenciánál nagyobb frekvenciájú optikai gerjesztéskor mutatózó vibrációs hőmérséklet megfelelő körülmények között oldatoknál is fennállhat, és a gerjesztett molekulák környezetében az oldaténál magasabb lokális hőmérséklet fellépésében nyilvánulhat meg. A kísérleti vizsgálatok alapján több oldatnál sikerült kimutattunk, hogy a lokális hőmérséklet a gerjesztő fény frekvenciájának és az oldat viszkozitásának a növelésével, valamint a gerjesztett állapot átlagos élettartamának (kioltóanyaggal való) csökkentésével növekszik. A lokális hőmérséklet révén mód nyílik a gerjesztett molekulák és a közeg kölcsönhatásának vizsgálatára is.

\* \* \*

A szerzők ezen a helyen is köszönetüket fejezik ki Budó Ágoston akadémikusnak, a József Attila Tudományegyetem Kísérleti Fizikai Intézete vezetőjének a vizsgálatok során nyújtott sokoldalú segítségért és az értékes diszkusszióért.



## IRODALOM

- [1] V. L. Ljovsin, Folyékony és szilárd anyagok fotolumineszcenciája, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1956.
- [2] Sz. I. Vavilov, A fény mikrostrukturája, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1955.
- [3] Á. Budó, Magyar Fizikai Folyóirat, 9, 269, 1961.
- [4] A. Kowski, B. Polacka, Z. Naturf. 17a, 352, 1962.
- [5] Б. И. Степанов, ДАН СССР, 112, 839, 1957; Изв. Акад. Наук СССР, 22, 1367, 1958.
- [6] М. Н. Аленцев, Опт. и Спектр., 4, 690, 1958.
- [7] М. Н. Аленцев, Л. А. Пахомычева, Изв. Акад. Наук СССР, 22, 1377, 1958.
- [8] М. Н. Аленцев, Л. А. Пахомычева, Изв. Акад. Наук СССР, 24, 734, 1960.
- [9] Л. А. Кравцов, А. Н. Рубинов, Опт. и Спектр. 12, 636, 1962.
- [10] Б. С. Непорент, Ж. Ф. Х. 13, 965, 1939; 21, 1111, 1947; 24, 1214, 1950. Ж. Эксп. и теор. физ. 21, 172, 1951.
- [11] Н. А. Борисевич, В. В. Грузинский, Опт. и Спектр. 14, 39, 1963; 15, 457, 1963.
- [12] В. А. Толкачев, Н. А. Борисевич, Опт. и Спектр. Т. 1, 16, Москва—Ленинград 1963.
- [13] Н. А. Борисевич, В. В. Грузинский, Опт. и Спектр. 14, 39, 1963.
- [14] В. В. Грузинский, Н. А. Борисевич, Опт. и Спектр. 15, 457, 1963.
- [15] Н. А. Борисевич, Acta Phys. et Chem. Szeged, 10, 9, 1964.
- [16] Н. А. Борисевич, В. В. Грузинский, В. А. Толкачев, Опт. и Спектр. 16, 171, 1964.
- [17] Е. Ф. Рязанова, М. С. Фадеева, Т. С. Павлина, Изв. Акад. Наук СССР, 24, 769, 1961.
- [18] Б. И. Степанов, Изв. Акад. Наук СССР, 20, 493, 1956.
- [19] Б. С. Непорент, Изв. Акад. Наук СССР, 22, 1372, 1958; ДАН СССР, 119, 682, 1958.
- [20] I. Ketskeméty, J. Dombi, R. Horvai, Acta Phys. Hung. 12, 263, 1960; 14, 165, 1962; Ann. Phys., 8, 342, 1961.
- [21] I. Ketskeméty, Acta Phys. Hung. 10, 429, 1959.
- [22] S. I. Wawilow, Z. Phys. 42, 311, 1927.
- [23] A. Jabłoński, Acta Phys. Polon. 2, 98, 1933.
- [24] Л. А. Гумерман, Труд. Физ. Инст. А. Н. СССР, 1, 77, 1938.
- [25] L. Kozma, Acta Phys. et Chem. Szeged, 9, 59, 1963.
- [26] I. Ketskeméty, J. Dombi, J. Hevesi, R. Horvai, L. Kozma, Acta Phys. et Chem. Szeged, 7, 88, 1961.
- [27] J. Hevesi részletesen másutt közlésre kerülő vizsgálatai.
- [28] D. Frackowiak, L. Korbutt, T. Korbutt, Bull. Acad. Polon., 6, 781, 1958.
- [29] J. Hevesi, L. Kozma, Acta Phys. et Chem. Szeged, 8, 103, 1962.
- [30] L. Kozma, L. Szalay, J. Hevesi, Acta Phys. et Chem. Szeged, 10, 67, 1964.
- [31] М. Д. Галанин, Труды ФИАН СССР, 12, 3, 1960.
- [32] I. Ketskeméty, J. Dombi, R. Horvai, J. Hevesi, L. Kozma, Acta Phys. et Chem. Szeged, 7, 17, 1961.
- [33] A. Kowski, Bull. Acad. Polon. 11, 567, 1963.
- [34] S. R. de Groot, Thermodynamics of Irreversible Processes, North Holland Publishing Co. Amsterdam, 1963. 51. old. (78) egyenlet.
- [35] J. Hevesi később közlendő mérései.
- [36] Th. Förster, Fluoreszenz organischer Verbindungen, Vandenhoeck és Ruprecht, Göttingen, 1951. 154. old.
- [37] A. Jabłoński, Acta Phys. Polon. 26, 427, 1964.
- [38] I. Norman, G. Porter, Proc. Roy. Soc. London A230, 399, 1955.
- [39] A. C. Albrecht, W. T. Simpson, J. Amer. Chem. Soc. 77, 4454, 1955.
- [40] A. C. Albrecht, J. Chem. Phys. 27, 1413, 1957.

- [41] *A. C. Albrecht*, J. Mol. Spectr. 6, 84, 1961.
- [42] *A. Jabłoński*, Bull. Acad. Polon. 8, 655, 1960.
- [43] *E. Lisicki*, Bull. Acad. Polon. 11, 665, 1963.
- [44] *L. Kozma, J. Hevesi, R. Horvai*, Acta Phys. et Chem. Szeged 10, 79, 1964.
- [45] *J. Dombi, I. Ketskeméty, L. Kozma*, Acta Phys. et Chem. Szeged, 10, 15, 1964.
- [46] *I. Ketskeméty, L. Szalay, Z. Várkonyi*, Acta Phys. et Chem. Szeged (megjelenőben).
- [47] *E. Lendvay*, International Symposium on Luminescence, Balatonvilágos, June 1961. Akadémiai Kiadó, Publishing House of the Hungarian Academy of Sciences, Budapest, 1962. 89. old.
- [48] *B. Stevens*, Mol. Phys. 3, 589, 1960.
- [49] *D. J. Blohincev*, J. Phys. SzSzSzR 1, 127, 1959.
- [50] *McDuff, G. e. J.* Chem. Phys. 37, 239, 1962.



# DISZLOKÁCIÓK KONTINUUM ELMÉLETE I.\*

A diszlokációk elméletének alapjai

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Kísérleti Fizikai Tanszék

Jelen dolgozatban a diszlokációk elméletének alapvető fogalmaiba kívántunk bevezetést nyújtani. Ebből következik, hogy itt számos kérdést nem is érintettünk, továbbá, hogy a szemléletesség érdekében bizonyos fogalmakat csak leegyszerűsítve tárgyaltunk. Néhány következő cikkben a diszlokációk tulajdonságainak kvantitatív leírását fogjuk megadni a kontinuum modell alapján.

## 1. Bevezetés

A szilárdtest-fizikai kutatások egyik jelentős területe napjainkban a rácshibák tulajdonságainak vizsgálata. Különösen nagyarányú munka folyik mind elméleti, mind kísérleti téren a diszlokációs mechanizmusok tanulmányozásával kapcsolatban. A diszlokációk — mint kristályhibák — létezése ma már közvetlen megfigyelések alapján is kétségtelenné vált, és jól ismeretes, hogy a szilárd testek fizikai és technológiai sajátágaiban ezeknek fundamentális szerepük van. Bár a diszlokációk jellegzetesen kristályhibák, matematikailag legkönnyebben a rugalmas kontinuum modell alapján vizsgálhatók, amely természetesen nem vezethet exakt eredményekre, azonban a tapasztalat szerint általában jó közelítést jelent.

A következő néhány cikkben a diszlokációk kontinuum elméletébe kívánunk betekintést nyújtani. A jelen első dolgozat célja a diszlokáció elmélet alapjainak kvalitatív ismertetése, a diszlokáció fogalmának tisztán geometriai szemlélet alapján való tisztázása. Természetesen távolról sem törekedhetünk teljességre még ebben a vonatkozásban sem. A tárgyalandó fogalmakat úgy választottuk meg, hogy azok megalapozásul szolgáljanak a diszlokációkat tartalmazó rugalmas kontinuumok matematikai elméletéhez. Ez a dolgozat főleg azokhoz kíván szólni, akiknek ez a terület még nem ismeretes. Ennek megfelelően megfontolásainkat elsősorban a szemléletre fogjuk alapozni. A diszlokációk körül kialakuló krisztallográfiai viszonyok szemléltetésénél csak az egyszerű köbös kristályra szorítunk, ahol az atomok elrendeződését három dimenzióban is relatíve könnyű áttekinteni. Ezen egyszerűsítés két szempontból is indokolható. Egyrészt sok, az egyszerű köbös kristályra alapozott számítás más anyagokra is kielégítő eredményt ad, másrészt egyéb típusú kristályokra vonatkozó számítás az előző eset általánosítását jelenti. Ez érthetővé válik, ha figyelembe vesszük, hogy a diszlokáció fogalmi szempontból nem kapcsolódik egyetlen kristálytípushoz sem, hanem általános jellegű kristályhibát jelent. Nyilvánvalóan ez indokolja a kontinuum modell alkalmazását is.

Egy kristályt tökéletesnek nevezünk, ha minden atomja az adott szerkezet által meghatározott rácspontokban helyezkedik el. Ha ettől a rendtől valamilyen

\* Érkezett 1964. júl. 19.

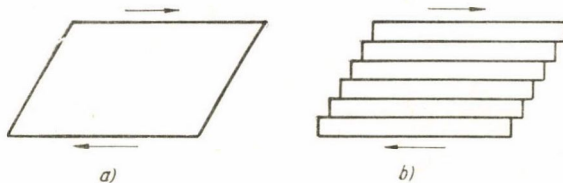
eltérés lép fel, kristályhibáról beszélünk. Bármilyen rácshiba körül olyan kicsiny tartomány alakul ki, ahol az atomok szabályos rendje megszűnik és bizonyos atomok körüli szomszédok elhelyezkedése eltérő lesz az ideálistól. Minden hiba egy sajátos atomkonfigurációt alakít ki maga körül.

A hibák leírásának direkt útja az lehetne, hogy megadnánk minden atomnak az ideális helyzettől való eltérését. Ezen általában járhatatlan út helyett célszerű a hibák hatását bizonyos jellegzetes tulajdonságaik alapján jellemeznünk, amelyek ismeretében az anyag sajátságaiban fellépő változások meghatározhatók anélkül, hogy ténylegesen ismernénk minden atom pontos helyzetét. Más szóval bármely rácshiba fogalmával nagyszámú atom helyzetének rövid jellemzését akarjuk megadni. Nyilvánvalóan sokkal könnyebb bizonyos típusú hibák tulajdonságainak ismeretében jellemezni egy kristályt, mint minden atomjának a helyzetét pontosan megadni.

Elegendően nagyszámú hiba esetén a keletkező rendellenességek mérhetően megváltoztatják a kristály fizikai és különösen a mechanikai tulajdonságait. Ezért a szilárdtest fizika tárgyát szükségképpen a tökéletes kristály és a kristályhibák együttes tanulmányozásának kell képeznie. A tökéletes kristály tulajdonságai kvantummechanikai módszerekkel, a diszlokációk általában a klasszikus fizika módszereivel tanulmányozhatók.

## 2. A diszlokáció — mint csúszási határ — fogalma

A kristályos testek képlékeny alakváltozása nagymértékben inhomogén és anizotróp. A tapasztalat azt mutatja, hogy a makroszkopikus alakváltozás nem homogén nyírás által megy végbe a kristályban (1a ábra), hanem diszkrét atomsíkok csúsznak el egymáson jól definiált kristálytani síkok mentén, kártyalapok egymáson való elcsúszásához hasonlóan (1b ábra). Azokat a síkokat, amelyek mentén a csúszás fellép, csúszási síkoknak nevezzük. Ezek rendszerint a kristály ún. szoros illeszkedésű síkjai, a csúszás iránya pedig többnyire a szoros illeszkedés iránya [1]. Az elcsúszás nagysága rendszerint sok atomtávolsággal egyenlő. Ez általában megadható a kristály primitív translációs vektora — a csúszás vektor — egész számú többszöröseként. Egy-egyinek mondjuk a csúszást egy csúszósíkban, ha minden atom a sík egyik oldalán



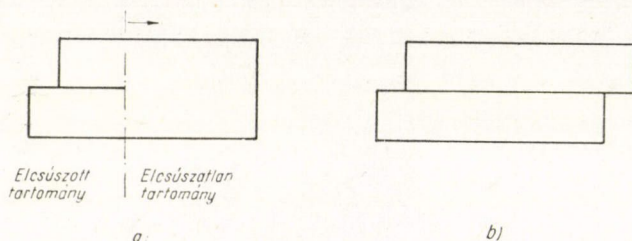
1. ábra. Kristályok maradáno alakváltozása nem homogén nyírás által megy végbe (a), hanem diszkrét atomsíkok mentén történő elcsúszással (b)

azon helyekre mozdult el a csúszás folyamán, ahol az eredeti helyzetben a csúszás irányában a legközelebb elhelyezkedő szomszédja volt.

A diszlokáció elmélet alapját az képezi, hogy a csúszás lokális folyamat, és a képlékeny alakváltozás bizonyos elcsúszott tartományok fokozatos kiterjedése ré-



vén (2a ábra), nem pedig a csúszási síkok egyidejű és homogén elcsúszásával meg végbe (2b ábra). Ebből pedig nyilvánvaló, hogy kell a csúszósíkokban létezniük bizonyos határoknak, amelyek a már elcsúszott és a még el nem csúszott tartományokat



2. ábra. A plasztikus deformáció lokális elcsúszások eredményeként jön létre (a). Két kristályrész egymáshoz képesti teljes elcsúszása (b) nem az egész csúszósík menti egyidejű elmozdulással, hanem az elcsúszott tartomány fokozatos kiterjedése által lép fel

határolják. Ezeket a határokat nevezzük diszlokációknak és a csúszási folyamatot (az elcsúszott tartományok kiterjedését) a diszlokációk mozgásának. A 2a ábra mutatja, hogy ha az elcsúszott tartomány határa (a diszlokáció) mozog a nyíl irányában, akkor a csúszás kiterjed az egész csúszósíkra, s a végállapot a b ábrának megfelelő lesz.

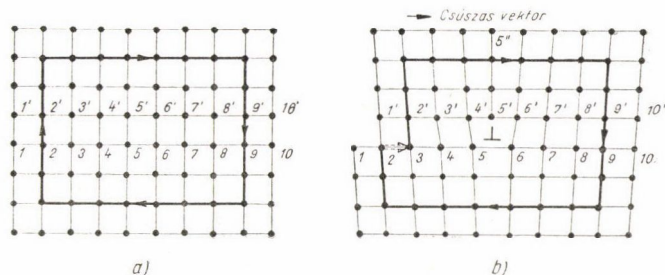
### 2.1. Éldiszlokáció

Amikor az elcsúszott és el nem csúszott tartományok határa a csúszási síkban merőleges a csúszás irányára, éldiszlokációról beszélünk [2]. A 3b ábra egy éldiszlokációt tartalmazó kristály modelljét mutatja a diszlokációra merőleges metszeten. Jól látható, hogy a felső kristályrész eggyel több függőleges atomsíkot tartalmaz, mint az ehhez kapcsolódó alsó rész. A felső részbe beékelődött „többszörös atomsík” éle képezi az elcsúszott és el nem csúszott tartományok határát — tehát a diszlokációt — innen az éldiszlokáció elnevezés. A diszlokáció közvetlen környezetében néhány atomtávolságra kiterjedő hibás tartomány figyelhető meg, ahol az egyes atomok körüli szomszédok elhelyezkedése jelentősen eltér az egyszerű köbös elrendezéstől. Ezt a tartományt a diszlokáció centrumának, vagy üregének nevezzük. A többszörös atomsík élei mentén fekvő atomoknál a szomszédok száma más, mint a deformálatlan kristályban (Pl. az 5. számú atom körül a b ábrán 7, az a ábrán 8 szomszéd van.) A diszlokáció ürege mentén az atomok pontos elhelyezkedése nem ismeretes.

A diszlokáció bal oldalán a csúszósík mentén az atomok kicsiny rugalmas nyírástól eltekintve szabályosan kapcsolódnak össze. Ez annak következménye, hogy a csúszás vektor éppen egyenlő a rács translációs vektorával. Egységnyi csúszás tehát nem változtatja meg az atomok rendjét a csúszósík mentén, kivéve a diszlokáció közvetlen környezetét. Ezért a diszlokáció *vonali menti* (az ábrán a rajzra merőleges) rendezetlenséget eredményez a kristályban, s emiatt szokás diszlokáció vonalról beszélni. Ha a diszlokáció végig mozog a csúszósíkon (a kristály

egyik oldalától a másikig), a kristályon egy atomtávolságnyi maradandó alakváltozás lépne fel.

A kristály azon részeit, ahol az atomok rendje kicsiny rugalmas nyírásoktól eltekintve nem változott, jó anyagnak nevezzük. Vegyünk fel az ideális kristályban egy „atomi lépésekből” álló *zárt* görbét (3a ábra) úgy, hogy a diszlokáció létre-

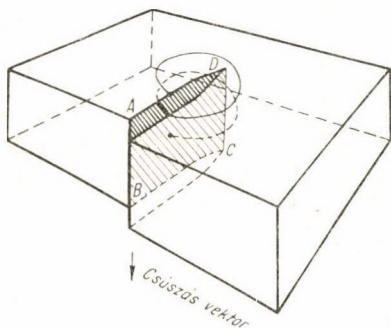


3. ábra. (a) tökéletes kristály, (b) éldiszlokáció köbös kristályban (a  $\perp$  szimbólum a diszlokációt jelöli)

hozása után ez mindenütt jó anyagban haladjon. A diszlokáció jelenléte esetén ez a görbe nem zárt, s a záródási hiány éppen a csúszás vektorával egyenlő (3b ábra). Az ily módon definiált zárt görbét Burgers körnek, a csúszás vektorát pedig Burgers vektornak nevezzük. A 3. ábra alapján mondhatjuk még, hogy éldiszlokációt létrehozhatunk úgy, hogy a csúszási sík alatt a csúszási síkra merőlegesen egy fél atom-síkot eltávolítunk a kristályból, vagy egy fél atomsíkot ( $5'$ ,  $5''$ ) a csúszási sík fölé kényszerítünk. Ez a megfontolás világosan mutatja, hogy diszlokációk tömegtranszport (intersticiális atomok, vakanciák mozgása) által is keletkezhetnek.

## 2.2. Csavardiszlokáció

Ha az elcsúszott tartomány határvonala párhuzamos a csúszás irányával, csavardiszlokációról beszélünk [3]. A 4. ábra egységnyi elcsúszást mutat az  $ABCD$



4. ábra. Csavardiszlokáció modellje.  
Az  $ABCD$  elcsúszott terület  
CD határvonala a diszlokáció

terület mentén és a diszlokáció most a  $CD$  határvonal. A csavardiszlokáció ürege is olyan tartományt képez, ahol az atomok hibásan illeszkednek a csúszási sík két oldalán, azonban most az üreg mentén fekvő atomok körüli szomszédok száma nem különbözik a hibátlan rész atomjaihoz képest. A diszlokációhoz közeli atomok szabályos csavarvonal mentén helyezkednek el, ezért nevezzük ezt csavardiszlokációnak. Az egész kristály úgy is tekinthető, mintha egy csavarfelület mentén elhelyezkedő egyetlen atomsíkból állna. Az atomok elmozdulásai csavardiszlokáció körül forgásszimmetrikusak. A kialakuló rugalmas deformáció tiszta nyírás, ezért a csúszási sík nem egyértelműen



meghatározott. Bármely csúszósíkban hozunk létre olyan elmozdulást, amely a  $CD$  vonal mentén végződik, ugyanaz a csavardiszlokáció keletkezik.

A csavardiszlokáció csúszósíkja is egyértelműen definiálható, ha a diszlokációnak a kristály felületére való kibukkanását tekintjük. Az atomok csavarfelületen való elhelyezkedése miatt egy atomi lépcső jelenik meg a felületen. Más csúszósíkban keletkező diszlokáció az atomok csavarfelületen való elhelyezkedését nem változtatja ugyan meg, de a lépcső helyzete a felületen megváltozik.

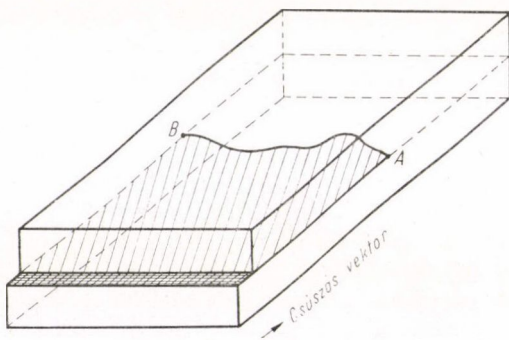
### 2.3. Általános diszlokációk

Az olyan egyenes diszlokációt, amely sem tiszta él-, sem tiszta csavarjellegű, „kevert” diszlokációnak nevezzük. Ez akkor keletkezik, ha az elcsúszás iránya valamilyen  $0$ -tól és  $\pi/2$ -től különböző szöget zár be az elcsúszott terület határvonalával, és úgy tekinthető mint amely él és csavarkomponensekből tevődik össze. A komponensek nagyságát a diszlokációvonal és a csúszás iránya közti szög határozza meg.

Általában amikor maradandó alakváltozás lép fel egy csúszósík mentén, az adott irányban és adott mértékben elcsúszott terület alakja tetszőleges lehet a csúszósíkban. Ennek határa akkor egy tetszőleges síkgörbe, amelynek érintője minden pontban más-más szöget zár be a csúszás irányával, tehát ekkor a diszlokáció folytonosan változtatja a jellegét a görbe mentén. Az él- vagy csavarjelleg általában tehát nem egy egész diszlokáció tulajdonsága, hanem a lokális orientáció a mérvadó a diszlokáció jellegére. A lényeges az, hogy a diszlokáció az elcsúszott terület határvonala, s ennek görbületsége azt fejezi ki, hogy a csúszás nem történt egyenletesen a csúszósík mentén (5. ábra).

Felmerülhet a kérdés, hogy van-e valamilyen akadálya a diszlokáció tetszőleges görbülésének. Energetikai okokból várható, hogy a diszlokáció igyekszik kiegyenesedni amennyire csak lehetséges, mert ez csökkenti a körülötte kialakuló feszültségtér energiáját. Más szóval a diszlokáció a lehető legrövidebb alakot veszi fel az adott körülmények között. Azt a hatást, amely a diszlokáció hosszát csökkenti törekszik, a diszlokáció vonalmenti feszültségének nevezzük.

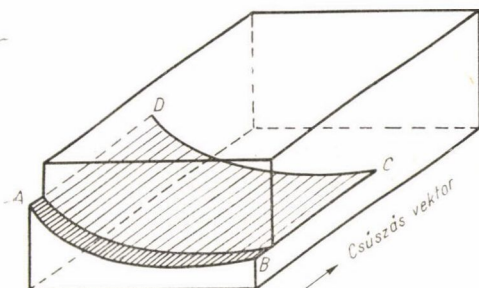
A fentiekben vizsgált valamilyen diszlokáció egyetlen csúszósíkban feküdt, amely tartalmazta a diszlokációt és a csúszás vektorát is. Ezt a síkot neveztük csúszósíknak. Általános esetben az elcsúszott terület egy tetszőleges felület része lehet, amely mindenütt tartalmazza a csúszás vektorát. Egy általános csúszási felületre mutat példát a 6. ábra. Az elcsúszott terület az  $ABCD$ , és a diszlokáció a  $CD$  vonal mentén fekszik. Ez mindenütt merőleges az elcsúszásra, ezért éldiszlokáció, ami úgy hozható létre,



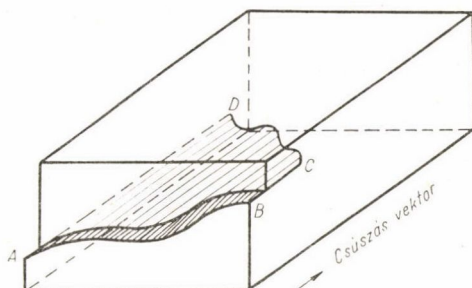
5. ábra. Inhomogén csúszás adott csúszósíkban. A diszlokáció jellege folytonosan változik az A, B pontok között

hogy olyan többlet atomsíkot viszünk a kristályba, amelynek alsó éle a  $CD$  vonal alakját követi.

Még általánosabb esetet jelent, amikor a csúszás mértéke változik a csúszási felület mentén, amint ez a 7. ábrán látható. Itt az  $ABCD$  felület ismét tartalmazza mindenütt a csúszás vektorát és a felület alakja követi az  $AB$  vonalat, most azonban egy tetszőleges  $CD$  görbe mentén fekvő diszlokációban végződik. Azt állapít-



6. ábra. Általános csúszási felület.  
A  $DC$  vonal mentén éldiszlokáció keletkezett



7. ábra. Inhomogén csúszás általános  
csúszási felület mentén

hatjuk meg mindezek alapján, hogy tetszőleges görbe mentén fekvő diszlokációt létrehozhatunk valamely felület mentén végzett alkalmas csúszással. Mint látni fogjuk (4. pont) a diszlokációk teljesen általánosan jellemezhetők azzal a csúszással, amelynek eredményeként keletkeztek.

A kristály atomi felépítését tekintve egy adott diszlokációhoz rendelhető legáltalánosabb felület is csúszási síkok részeitől tevődik össze, amelyek a közös csúszásvektorral párhuzamos egyenes szakaszok mentén metszik egymást. Ezért bármely diszlokáció egyenes szakaszokból tehető össze, amelyek hossza esetleg csak néhány atomtávolság lehet.

### 3. A maradandó alakváltozás mechanizmusa

A diszlokáció olyan konfigurációja az atomoknak, amely mozoghat a kristályon keresztül. A valódi kristályok mindig tartalmaznak nagy számú diszlokációt. A kristályok maradandó alakváltozása vagy plasztikus deformációja a diszlokációk mozgásával írható le. A „diszlokáció mozgás” kifejezés egy kényelmes leírási módja nagyszámú atom mozgásának; mindegyik atom az atomtávolság törtrészeivel mozdul el, amikor a diszlokációt képező atomkonfiguráció egy atomtávolsággal elmozdul. A diszlokáció mozoghat a csúszósíkja mentén vagy erre merőlegesen. A csúszósíkban vagy csúszási felületen való mozgást csúszásnak (glide, slip), a csúszósíkra merőleges mozgást kúszásnak (climb) nevezzük.

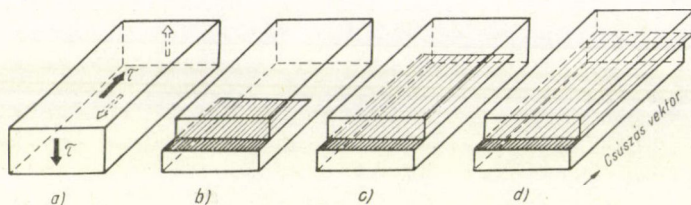
A diszlokáció mozgása az atomoknak csak csekély mértékű átrendeződésével jár együtt, s ezért a diszlokáció igen könnyen mozoghat. Ez magyarázza azt a tapasztalati tényt, hogy a reális (tehát diszlokációt tartalmazó) kristály már sok nagyságrenddel kisebb feszültségnél szenved maradandó alakváltozást, mint azt elméletileg az ideális kristályra várni lehetne [4]. A 8. ábrán négy helyzetben láthatunk



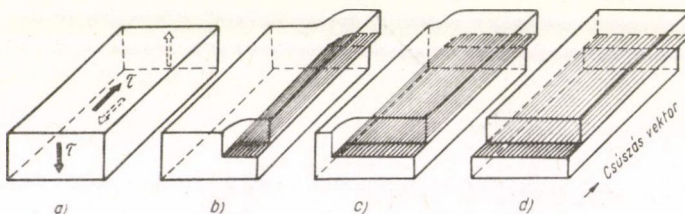
egy éldiszlókációt, amint csúszik keresztül a kristályon. Kezdetben a kristály teljesen deformálatlan, a végső állapotban (d) pedig a kristály felső fele egy atomtávolsággal elcsúszott helyzetben van az alsóhoz képest.

A 9. ábrán csavardiszlókációnak a kristályon való végigcsúszását láthatjuk. A csúszás vektor és az alkalmazott nyírási feszültség ugyanaz mint a 8. ábrán, továbbá az elcsúszással járó makroszkopikus alakváltozás is megegyezik az előzővel. Ezen eredmény azt mutatja, hogy a diszlókáció csúszásakor fellépő plasztikus deformáció *nyírás*, amelyet a csúszási sík és a csúszás iránya szab meg. A makroszkopikus deformáció ezáltal független a diszlókáció vonal irányától. Ez a tény gyakran zavarra vezet. Amikor egy diszlókáció végigsúrol adott területet a csúszósík-jában, ezen terület elcsúszásának mértéke (s ezzel a hozzátartozó maradandó deformáció) egyértelműen meghatározott a csúszás vektorral.

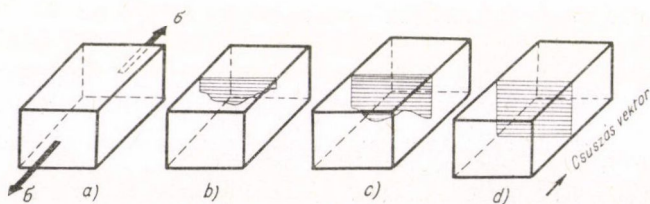
A 10. ábra éldiszlókáció kúszását mutatja. Ez a mozgás a többlet atomsík lefelé való kiterjedését eredményezi. A végső állapotban a kristály hossza az al-



8. ábra. Éldiszlókáció mozgásakor keletkező maradandó alakváltozás. Ha a diszlókáció végighalad a csúszósík mentén (b, c) az alsó és felső kristályrész között egységnyi elcsúszás adódik



9. ábra. Csavardiszlókáció mozgásakor keletkező alakváltozás. Látható, hogy makroszkopikus szempontból mindkét típusú diszlókáció csúszása ugyanarra az eredményre vezet

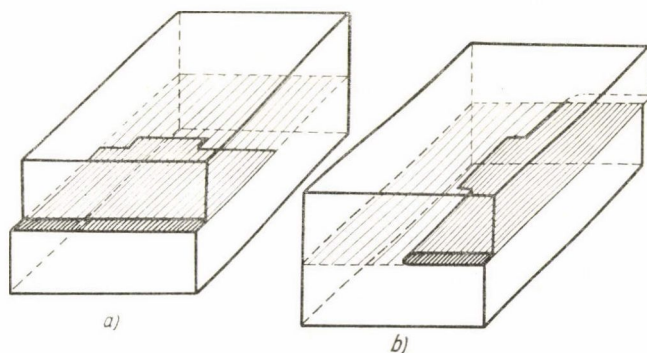


10. ábra. Éldiszlókáció „kúszása”-kor fellépő alakváltozás. Ha a diszlókáció végighalad a többlet atomsík mentén (b, c), a kristály hossza egy atomtávolsággal megnövekszik (d)

kalmazott feszültség irányában a közbeékelődött atomsík által — amely a folyamat alatt a diszlokációhoz tartozott — egy atomtávolsággal megnövekedett. Ha a diszlokáció felfelé mozog, a többletatomsík csökkenni fog. Mindkét folyamat csak úgy jöhet létre, ha a többlet atomsíkhöz újabb atomok kapcsolódnak, vagy atomok válnak le róla. A kúszás tehát tömegtranszportot igényel. A 10. ábrán a kúszás két módon indulhat meg: 1. intersticiális atomok diffundálnak a diszlokációhoz és a többletatomsíkhöz kapcsolódnak; 2. a környező kristály atomjai kapcsolódnak a többletatomsíkhöz vakanciákat hagyva maguk mögött. A másik irányba való kúszás ugyancsak kétféle módon jöhet létre: 1. vakanciák diffundálnak a diszlokációhoz és ezáltal csökkentik a többlet atomsík atomjainak számát; 2. atomok válnak le a többlet atomsíkról intersticiális atomokat képezve vagy eldiffundálva a diszlokációtól. Ezért az éldiszlokáció egyaránt lehet forrása vagy nyelője az előbbi ponthibáknak. A kúszást sokszor nem-konzervatív mozgásnak nevezik a többlet atomsík anyagmennyiségének (atomszámának) változása miatt. A csúszás konzervatív mozgás, mert ezalatt a diszlokáció magja mentén az atomok száma nem változik.

### 3.1. Könyökök és lépcsők

Az előzőekben egyenes diszlokációk csúszását vizsgáltuk, s feltettük hallgatólagosan, hogy a diszlokáció vonal egészében elmozdul a csúszás során. Általában azonban a mozgás nem homogén módon megy végbe, amint ezt már az éldiszlokáció kúszásánál láttuk, s ekkor a diszlokáció vonalon „könyökök” (kink) vagy „lépcsők” (jog) keletkeznek.



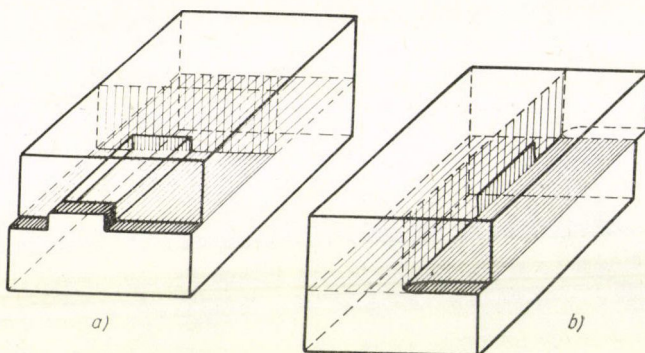
11. ábra. Két „könyököt” (csúszósíkban fekvő kihajlást) tartalmazó él (a), illetve csavardiszlokáció (b)

A 11. ábra könyököt mutat él- és csavardiszlokáción. A könyök olyan kihajlás a diszlokáció vonalon, amely a csúszósíkban fekszik. Ez könnyen keletkezhet és meg is szűnhet csúszás következtében. A könyökök azért keletkeznek, mert a diszlokációk általában a szoros csomagolású irányokban helyezkednek el. Egy kevert diszlokáció, amely nem a szoros csomagolás irányában fekszik, úgy fogható fel, mint egymásutáni kicsiny diszlokáció szakaszok sorozata, amelyek a szoros csomagolás irányában fekszenek és könyökökkel kapcsolódnak össze. A diszlokáció-



nek ekkor „zig-zag” formája van. A diszlokáció mozgása ebben az esetben a könyökök mozgása révén jön létre. Amint egy könyök végighalad a diszlokáció vonal mentén, a diszlokáció egy csúszás vektornyi távolsággal elmozdul.

A 12. ábra lépcsőt mutat él- és csavardiszlokáción. A lépcső olyan kihajlás a diszlokáció vonalon, amely nem fekszik az eredeti diszlokáció csúszósíkjában. A 12. ábrán az éldiszlokáción levő lépcső csak vakanciák vagy intersticiális atomok



12. ábra. Két „lépcsőt” (nem csúszósíkban fekvő kihajlást) tartalmazó él (a), illetve csavar- diszlokáció (b)

hozzáadásával vagy elvételével szüntethető meg, azaz nem-konzervatív mozgással. Az éldiszlokáció kúszását ezért a lépcsők mozgása eredményezi. Amint a lépcső elmozdul a diszlokáció vonal mentén, a diszlokáció vonal elmozdul felfelé egy atomtávolsággal. A diszlokációk mozgása tehát csúszást, a könyökök vagy lépcsők mozgása pedig diszlokáció elmozdulást eredményez.

Csavardiszlokáción a lépcső nem ennyire egyértelmű, a fogalom azonban általánosan használatos. A 12. ábrán a lépcső eliminálható csúszás által, azonban ennek egy másik csúszási síkban kell végbemennie. Ha csavardiszlokáció csúszik a saját csúszósíkjában, akkor a lépcső csak nem-konzervatív módon tud mozogni. Csavardiszlokáción lépcsők az ún. keresztcsúszási folyamatoknál keletkeznek, amikor valamely csúszósíkban mozgó csavardiszlokáció egy másik csúszási síkba megy át.

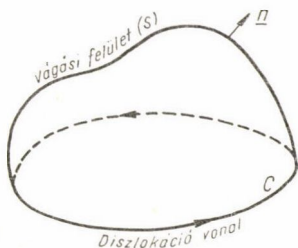
Lépcsők és könyökök keletkezésének egy másik útja az, amikor diszlokációk mozgásuk során metszik egymást. Ha egy diszlokáció metsz egy másikat, ezen olyan lépcső vagy könyök keletkezik, amelynek nagysága és iránya egyenlő a másik diszlokáció csúszási (vagy Burgers) vektorával és fordítva. Ez könnyen látható a csúszásról kialakított kép alapján. Bármely vonal szenved metszést a csúszósíkjában, a metszési pontban egy a másik diszlokációhoz tartozó csúszás-vektor nagyságú törés keletkezik.

#### 4. Diszlokációk általános definíciója

Az előzőekben végzett megfontolások mutatják, hogy a diszlokációk és a csúszási felület alakjára általában semmilyen megszorítás nem áll fenn. Szükséges tehát a diszlokációk olyan általános definícióját is megadnunk, amely bármely



esetre érvényes. Induljunk ki egy tökéletes kristályból. Vágjuk fel a kristályt egy tetszőleges  $S$  felület mentén, amelyet egy zárt (különben tetszőleges)  $C$  görbe határol (13. ábra). A görbe speciális esetekben metszheti a kristály felületét. Az  $S$  felület normálisának pozitív irányát a görbe körüljárásának megfelelően a jobb csavar szabállyal rögzítjük le. Képzeljük el, hogy az  $S$  felület negatív oldalán levő anyagot a pozitív oldalához képest mindenütt azonos  $b$  Burgers vektorral elmozdítjuk. A  $b$  vektor nagysága tehát a kristály translációs vektorával egyenlő (csúszás vektor). Az  $S$  felület (a csúszási felület) két oldalán levő anyag mindenütt  $b$ -vel való relatív



13. ábra. Tetszőleges zárt görbe mentén fekvő diszlokáció létrehozásához

elmozdulása általában üregek keletkezését, illetve az anyagrészek egymásba hatolását tenné szükségessé. Tegyük fel gondolatban, hogy alkalmas anyag hozzáadásával vagy elvételével elérhetjük a mindenütt  $b$ -vel való elmozdulást és az anyag folytonosságát is megtarthatjuk. Ha ezek után összehegesztjük az anyagot a vágási felületnél, akkor a  $C$  görbe mentén egy általános diszlokációt kapunk.

Mivel  $b$ -t rácsvektornak választottuk, az atomok illeszkedése — kicsiny rugalmas nyírástól eltekintve — az egész felület mentén jó lesz, kivéve a  $C$  diszlokáció közvetlen környezetét, ahol jelentékeny deformációt és rossz illeszkedést találunk. A diszlokációt a  $C$  görbe és a  $b$  Burgers vektor jellemzi; megmutat-

ható, hogy tulajdonságai nem függenek a vágási felület választásától ugyanazon  $C$  határoló görbe esetén [5]. Két eredmény azonnal következik ebből a definícióból: 1. a diszlokáció nem végződhet a kristályon belül; 2. egy diszlokáció Burgers vektora állandó a diszlokáció vonal mentén.

A 14a ábra mutatja, hogyan alkalmazható ezen általános definíció éldiszlokáció esetében. Az előbbieken definiált  $S$  felületnek most a csúszósík elcsúszott tartományát választottuk. A 14b ábra kihúzott része ( $ABCDEF$ ) adja az atomok elrendeződését a diszlokációra merőleges atomsíkban. A bal oldali felső része a kristálynak, amely az  $S$  felület negatív oldalán helyezkedik el, egy Burgers vektornyi távolsággal elmozdult az alsó részhez képest.

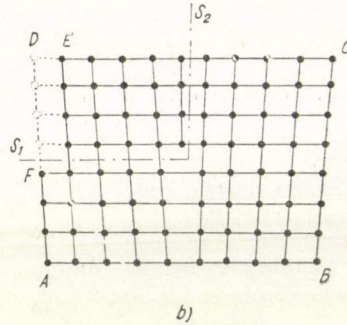
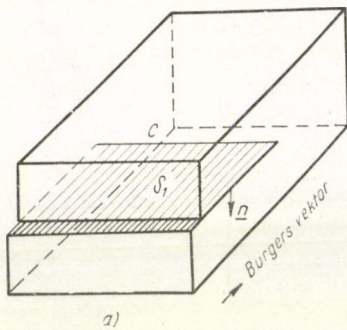
A 14c ábra olyan példát mutat, amikor az  $S$  felületet a diszlokáció fölötti többlet atomsík mentén választjuk meg. Az  $n$  normális a  $b$  ábra bal oldala felé mutat. A diszlokáció létrehozása most úgy valósítható meg, hogy az  $S$  felület mentén felvágjuk az anyagot és egy többlet atomsíkot kényszerítünk bele. Ez azonban csak akkor történhet meg, ha a kristály felső részének egyik oldalát elmozdítjuk az alsóhoz képest a Burgers vektorral. A kristály alakját a diszlokáció vonalra merőlegesen most a  $b$  ábrán az  $ABCD$  alakzat mutatja. Látható, hogy az atomok elrendeződése az üreg mentén mindkét esetben ugyanaz, tehát a diszlokáció nem függ az  $S$  felület választásától.

Az előzőek során egy határozott előjelkonvenciót rögzítettünk le. A jelöléseknek és irányításoknak a diszlokációk matematikai elméletének kifejtésénél lesz lényeges szerepük.

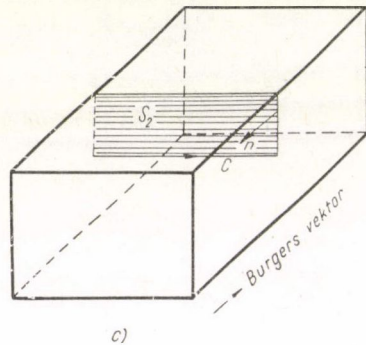
A diszlokációk most megadott definíciója nyilvánvalóan rugalmas kontinuumra is alkalmazható. Egy probléma azonban rögtön felmerül. Ha a kontinuumban (folytonos eloszlású anyagban) készítünk egy zárt görbével határolt vágási felüle-



tet, ennek mindenütt — tehát a felület végeinél, a zárt görbe mentén is —  $b$ -vel való elmozdítása végtelen nagy feszültségeket igényel. Ez a probléma nem merül fel kristályok esetén a diszkrét atomi szerkezet miatt. Bárhogy is vesszük fel a vágási felületet a kristályban, ezt szükségképpen az atomok közti üreg határolja. Ezért a megfelelő kristályrészek mindenütt  $b$ -vel való elmozdítása véges feszültséggel elérhető. Ezt a tényt figyelembe véve a kérdéses nehézség a kontinuumban úgy kerülhető el, hogy a diszlokáció létrehozása előtt a diszlokációt meghatározó zárt görbe

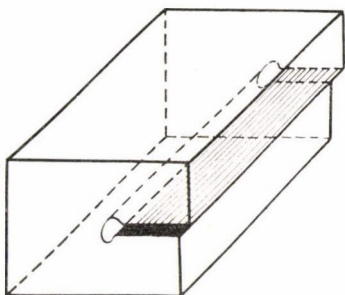


14. ábra. Az általános definíció alkalmazása éldiszlokációra. A (b) ábra mutatja az atomok elrendeződését a diszlokációra merőleges síkban a kétféle vágási felület alkalmazásakor. Látható ebből, hogy a diszlokáció (az atomok elrendeződése a csúszási határ mentén) nem függ a vágási felület választásától



mentén gondolatban egy  $r_0$  sugarú üreget létesítünk. Az ezután képezett vágási felület tehát ebben az üregben végződik és így a mindenütt  $b$ -vel való elmozdítás itt is véges feszültséggel lehetővé válik (15. ábra). Ha a diszlokáció tulajdonságait lineáris rugalmasságtan alapján akarjuk vizsgálni, az üreg  $r_0$  sugarát úgy kell megválasztanunk, hogy kirekesszük a kontinuumból azt a térrészt, ahol a deformációk nagysága miatt a Hooke-törvény már nem érvényes.

Természetesen ez az eljárás csak akkor alkalmazható, ha megengedhető elhanyagolásokra vezet. Ennek eldöntéséhez ismernünk kell a diszlokáció „finomszerkezetét” vagy más szóval az atomok elrendeződését a diszlokáció centruma közelében. A Hooke-törvény itt a diszkrét atomi szerkezet figyelembevételével sem alkalmazható. Ennél a kérdésnél tekintetbe kell vennünk a kristály periodikus szerkezetét. Sokféle, az atomok között működő erőkire alapozott közelítő módszer ismere-



15. ábra. Csavardiszlókáció modellje rugalmas kontinuumban. A végtelen feszültségek elkerülésére a diszlókáció vonal mentén az anyagból egy  $r_0$  sugarú üreget gondolatban eltávolítottunk

tes. A legegyszerűbb Peierlstől származik, aki a csúsztatásban fellépő nyírófeszültség változását egyszerű szinuszosnak tételezte fel. Ez a módszer Peierls—Nabarro modell néven ismeretes [1]. Bár ez kiterjedten használatos a diszlókációk vizsgálatánál, az ezzel kapcsolatos eredményeket mégis fenn tartással lehet csak elfogadnunk a szinusz törvény feltételezése miatt.

A diszlókáció vonal mentén az atomok rossz illeszkedése véges szélességű tartományra terjed ki. A csúsztatásnak azt a területét, ahol az atomok illeszkedése egy meghatározott mértékűnél rosszabb, a diszlókáció szélességének nevezzük. Mértékül általában a maximális nyírási deformáció felét szokták venni. A diszlókáció üreg vizsgálatának legfontosabb eredménye a diszlókáció szélességének meghatározása [5]. A diszlókáció szé-

lessége általában néhány Burgers vektornyi távolsággal egyenlő. A szélességnek a diszlókációk csúsztatásához szükséges feszültségnél van fontos szerepe.

### 5. A maradandó alakváltozás dinamikája

A 3. pontban leírtuk a kristályok plasztikus deformációját mint a diszlókációmozgás eredményét. A következőkben a diszlókációk mozgását dinamikai és energetikai szempontból vizsgáljuk meg. A 3. ábrán láttuk, hogy a diszlókáció környezetében van egy tartomány, ahol az atomok hibásan illeszkednek a csúsztatás mentén. Ha a diszlókáció mozog, az atomok rossz illeszkedése a diszlókáció környezetében az elmozdulással periodikusan változik  $b$  periódussal; minden Burgers vektorral való elmozdulás után az atomok konfigurációja önmagába megy át. A rossz illeszkedéssel járó rugalmas energia ugyanezzel a periódussal változik. Amikor a diszlókáció a 3. ábrán mutatott helyzetben van, az atomok konfigurációja szimmetrikus. Tegyük fel, hogy a diszlókációt kimozdítjuk ebből a helyzetből az elcsúszás növekedésének irányában. Az el nem csúszott oldalon fekvő atomok ekkor a kristályt az eredeti állapotba igyekeznek visszatéríteni, az elcsúszott oldalon levő atomok hatása pedig a következő ilyen helyzetbe való elcsúszást akarja kialakítani. A diszlókáció centrumában levő atom „holt helyzetben” van. A szimmetrikus helyzetből való elmozdulás pillanatában az egyik oldalon levő atomok közötti erők ellenében végzett munka egyenlő a másik oldalon levő atomok által végzett munkával. Így ebből a helyzetből a diszlókáció nulla feszültség hatására is elmozdulhat. Azonban mielőtt a diszlókáció a következő szimmetrikus helyzetbe jutna, át kell haladnia aszimmetrikus helyzeteken, ahol az atomok közötti erők nem kompenzálják ki egymást, ezért a diszlókációnak egyik szimmetrikus helyzetből a másikba való elmozdításához nullától különböző erő szükséges. Teljesen hasonló megfontolás érvényes a csavardiszlókációra is.

A rossz illeszkedés energiája a 3. ábrán vázolt helyzetben minimum (létezik egy másik szimmetrikus helyzet is, félúton két ilyen helyzet között ugyancsak minimális energiával). Az energia minimumok között maximumok helyezkednek el,



s ezek miatt lép fel a kristály ellenállása a diszlokáció mozgással szemben. Ezen maximumon való áthaladáshoz — tehát a diszlokáció csúsztatásához — szükséges feszültség erősen függ a diszlokáció szélességétől. Ezt a feszültséget szokás Peierls feszültségnek nevezni. Megmutatható, hogy ez csökken a szélesség növekedésével [5]. Látható tehát, hogy a diszlokáció környezetének pontos ismerete alapvető fontosságú, ha a diszlokációt tartalmazó test képlékeny alakváltozásához szükséges nyírófeszültséget elméletileg akarjuk meghatározni. Hasonló megállapítások érvényesek a csavardiszlokációra is.

Előző megfontolásaink a szoros csomagolás irányában fekvő diszlokációkra vonatkoztak. Az egyszerű köbös kristályban a tiszta éldiszlokáció mindig ilyen irányú. Más szerkezetű kristályokban a csavardiszlokáció mindig a szoros csomagolás irányában fekszik, az éldiszlokáció azonban általában nem. A diszlokáció mozgásával szembeni ellenállás a szoros csomagolás irányában a legnagyobb.

### 5.1. Diszlokációkra ható erő

Külső feszültség hatására a kristályon maradó alakváltozás, amint ezt az előzőekben láttuk, meghatározott atomkonfiguráció kollektív mozgása és nagyszámú atom kölcsönhatása eredményeként alakul ki. Ennek közvetlen kvantitatív vizsgálata nyilvánvalóan nagy nehézségekkel járna. Ismét jelentékenyen leegyszerűsödik azonban a kép, ha a diszlokáció fogalmát felhasználjuk. A külső feszültség alakváltoztató hatása úgy fejezhető ki, hogy a feszültség erőhatást gyakorol a diszlokációra. Ennek az erőnek a fogalma azonban különbözik a tömegekre ható newtoni erő fogalmától. Ez az erő a kristály egy meghatározott geometriai struktúrája miatt lép fel, amely struktúrát a diszlokáció fogalmával jellemeztük. Ezért a diszlokációra ható erőt nem szabad összetéveszteni az atomokra ható erővel.

A 8., 9. és 10. ábrán láthatjuk azokat a feszültségeket, amelyek lényegesek a diszlokációra ható erő szempontjából. A 8. és 9. ábrán a csúszás a kristály alsó és felső lapján alkalmazott  $\tau$  feszültség hatására indul meg. Az első és hátsó lapon megjelenő feszültségek miatt a kristály, mint egész, egyensúlyban marad. A kristályban ébredő rugalmas feszültségek következtében a csúszósíkokban a külső feszültséggel megegyező feszültség lép fel. Ezen feszültség révén az atomokra erő hat, amely az alkalmazott erő irányába ezeket elmozdítani igyekszik; jobbra a felső részén a kristálynak és balra az alsó részén. A diszlokáció ugyanakkor jobbra mozdul el. Ez mutatja, hogy az ábrán megadott feszültségek az adott diszlokáción *jobbra* ható erőt eredményeznek.

A 10. ábra mutatja, hogy a kúszás valamely  $\sigma$  nyújtó feszültség hatására jön létre, amely a többlet atomsíknál ugyanekkora nyújtó feszültséget eredményez. (A kristály külső lapjainak nem kell szükségképpen párhuzamosaknak lenniük a csúszósíkkal vagy más speciális, a kristály belsejében felvett síkkal. Külső nyújtó feszültség eredményezhet nyíró feszültséget a kristály belsejében fekvő sík mentén és fordítva. Ezért a csúszás és kúszás egyaránt felléphet nyújtó és nyíró feszültségek hatására). Az atomokra ismét erő hat, amely a külső feszültség irányába akarja mozgatni őket. A diszlokáció most lefelé mozog, tehát a külső feszültség az adott típusú diszlokációra most lefelé ható erőt gyakorol. Kompresszió a diszlokációnak csak felfelé mozgását eredményezheti, ezért ekkor a diszlokációra felfelé irányuló erő hat. Ebből azt láthatjuk, hogy ha a külső feszültség irányt vált, akkor a diszlokációra ható erő is ellentétes irányú lesz.

Ha a 8., 9. ábrákon a diszlokáció mozog és ezáltal a kristály deformálódik, a külső feszültség munkát végez. Az elcsúszott terület növekedésekor a végzett munka területegységenként  $\tau b$  (a területegységre ható erő  $\tau$ , az elmozdulás pedig  $b$ ). Az elcsúszott terület növekménye egyenlő a diszlokáció által súrolt területtel. A csúszási felület növekedésekor területegységenként végzett munka segítségével definiálhatjuk a diszlokációra ható erőt. Ez számértékben egyenlő azzal a munkával, amely a hosszegységnyi diszlokáció hosszegységgel való elmozdításához — tehát a csúszási felület területegységgel való növeléséhez — szükséges. Ez azt jelenti, hogy mind csavar, mind éldiszlokáció esetében a hosszegységre ható erő  $\tau b$ , az iránya pedig a diszlokáció mozgásának irányába mutat. Általában a diszlokációra ható, a csúszást előidéző erő a Burgers vektor és a külső feszültségnek a csúszási síkban és a csúszás irányában ható komponensének ( $\tau$ ) szorzatával egyenlő. Nagysága nem függ a diszlokáció vonal csúszósíkban orientációjától. A  $\tau b$  erő iránya mindig merőleges a diszlokáció vonalra függetlenül az alkalmazott feszültségtől. Ez érvényes a kúszás esetében is. Amikor a diszlokáció halad a kristályban, a végzett munka területegységenként  $\sigma b$  (a hátsó lap elmozdult  $b$ -vel az elsőhöz képest, a területegységre ható erő  $\sigma$ ). Tehát az erő  $\sigma b$ -vel egyenlő és esetünkben lefelé mutat.

#### IRODALOM

- [1] C. Kittel: Introduction to Solid State Physics John-Wiley and Sons, New York 1953.
- A. H. Cottrell: Dislocations and Plastic Flow in Crystals, Clarendon Press, Oxford 1953.
- [2] C. J. Taylor: Proc. Roy. Soc. A145, 362, 1934.
- E. Orován: Z. Phys. 84, 634, 1934.
- M. Polányi: Z. Phys. 84, 660, 1934.
- [3] J. M. Burgers: Proc. Kon. Nad. Acad. Wat, 42, 293, 1939.
- [4] J. Frenkel: Z. Phys. 35, 652, 1926.
- [5] R. de Wit: Solid State Physics, 10, 249. Academic Press, New York, 1960.



# MEGJEGYZÉSEK A FLUORESZCENS MOLEKULÁK ABSZORPCIÓS ÉS EMISSZIÓS SZÍNKÉPÉNEK AZ ELMÉLETÉHEZ\*

HORVÁTH JÁNOS

József Attila Tudományegyetem Elméleti Fizikai Intézete, Szeged

Kvalitatív figyelembe véve fluoreszcens molekulák elektronjainak és atomi rezgéseinek a korrelációját, feltételezzük, hogy fényabszorpció esetében az abszorbeált energia egy része:  $\hbar(\omega - \omega_0)$ , ill. a gerjesztett és alapállapot közti sugárzásos átmenet esetében a visszamaradt  $\hbar(\omega - \omega_0)$  energia, hővé alakul át, ahol  $\hbar\omega_0$  az elektronállapotok közti energiakülönbség és  $\hbar\omega$  az abszorpciós, ill. emissziós folyamatban szerepet játszó foton energiája. Ily módon a molekula rezgési hőmérséklete megnövekszik az abszorpciós, ill. emissziós folyamat kezdetén, a termikus egyensúly során kialakult hőmérsékletéhez képest. E kézenfekvő feltevés alapján az abszorpciós és emissziós spektrum Blohincev-féle elmélete általánosítható az átmenet alatti korrelációs-fluktuáció figyelembe vételével és levezethető az abszorpciós és emissziós spektrum Dombi és munkatársai által kísérletileg meghatározott analitikus kifejezése. A levezetett spektrumok alapján nyerjük a Ljovsin-féle tükörszimmetriatörvényt és az általánosított Sztjepanov-féle sugárzási törvényt. Végül a molekulák rezgési fajhőjét, valamint a fluoreszcens molekulák és az oldószer molekulái közt fellépő termikus kölcsönhatás relaxációs idejét számítottuk ki, jó megegyezésben korábbi becslésekkel.

Szalay, Hevesi és Kozma [1] beszámoltak e folyóirat hasábjain azokról az igen széleskörű és kiterjedt vizsgálatokról, amelyek az utóbbi időben a lumineszkáló molekulák  $\alpha(\omega)$  abszorpciós és  $\varepsilon(\omega)$  fluoreszcencia-színképei közti összefüggéssel foglalkoztak. Ez a körülmény mentesít bennünket attól, hogy a fluoreszcens molekulák abszorpciós és emissziós színképeivel kapcsolatos elmélet jelenlegi állását ismertessük. A továbbiakban részletezendő vizsgálatra Dombi, Ketskemény és Kozma [2] nem olyan régen végzett kísérleti kutatása adta az indokot, akik figyelembe véve a Ljovsin-féle tükörszimmetria-törvényt, valamint az általánosított Sztjepanov-féle sugárzási törvényt [3, 4]:

$$\varepsilon(\omega)/\alpha_{\text{act}}(\omega) = d(\theta)n^2(\omega)\omega^2 \exp\{-\hbar\omega/\theta^*\}, \quad (0,1)$$

ahol

$$\alpha_{\text{act}}(\omega) = \alpha(\omega)\eta^*(\omega), \quad \theta^* = kT^* \quad \text{és} \quad \theta = kT, \quad (0,2)$$

megállapították, hogy az ún. aktív abszorpciós spektrum és az emissziós spektrum analitikusan a következő alakba írható:

$$\alpha_{\text{act}}(\omega) = \alpha_0 n(\omega) \omega e^{B\omega} \cosh^{-1}\{A(\omega - \omega_0)\} \quad (0,3)$$

és

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 n^3(\omega) \omega^3 e^{-B\omega} \cosh^{-1}\{A(\omega - \omega_0)\}. \quad (0,4)$$

Itt  $d(\theta)$  az  $\omega = 2\pi\nu$  frekvenciától független állandó, mely függ a  $\theta$  (energiaegységekben mért) hőmérséklettől;  $\eta^*(\omega)$  és  $n(\omega)$  a relatív kvantumhatásfok ill. a közeg

\* Érkezett 1964. szept. 6.

törésmutatója;  $h=2\pi\hbar$  és  $k$  a Planck-féle, ill. a Boltzmann-féle állandó, végül az  $\alpha_0$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $A$  és  $B$  kísérletileg meghatározandó, hőmérséklettől függő állandók. Ezek a formulák nagyszerűen leírják az említett spektrumok kontúráját, ha  $\theta^*$  kissé magasabb hőmérséklet mint  $\theta$ , ahol  $\theta$  az oldat hőmérséklete. Figyelembe véve a (0,1) egyenletet azonnal látható, hogy  $B=\hbar/2\theta^*$  és egyszerű dimenzió-analízis mutatja, hogy  $A=\hbar/\theta'$ . Mindazonáltal igen érdekesnek látszó probléma, hogy mi  $\theta^*$  és a  $\theta'$  hőmérséklet fizikai jelentése és hogyan vezethető le a (0,3) és (0,4) alatti formula.

A továbbiakban megmutatjuk, hogy kézenfekvő feltevések alapján, figyelembe véve a sugárzási folyamatok alatt szerepet játszó bizonyos idő-korrelációs és fluktuációs effektusokat, a (0,3) és (0,4) formulák egyszerűen levezethetők annak a módszernek a közvetlen általánosításával, melyet *Blohincev* [5] alkalmazott a *Ljovsin*-féle tükröszimmetria-törvény elméleti megalapozásánál. Bebizonyítjuk továbbá, hogy  $\theta'=2\theta$ , és  $\theta^*$  a molekula vibrációs hőmérséklete az abszorpció, ill. az emisszió pillanatában. Végül, ha a  $\theta^*$  hőmérsékletet kísérletileg meghatározzuk (pl. *Dombi* és *munkatársai* [2] mérése alapján), kiszámítható a molekula vibrációs fájhője, és (ha ismeretes a gerjesztett állapot csillapodási ideje) kiszámítható a fluoreszkáló molekulák és az oldószer molekulái közti termikus kölcsönhatás relaxációs ideje. Mindkét esetben a korábbi becslésekkel jól egyező eredményeket kaptunk.

### 1. §. Általános megjegyzések az abszorpció és emissziós spektrumok elméletéhez és a fluoreszkáló molekulák szerkezetére vonatkozó általános feltevések

Ismeretes, hogy atomok és molekulák fényabszorpciója és emissziója értelmezhető a perturbációszámítás alapján. Az atomi rendszer és a sugárzási tér két kvantummechanikai rendszer, melyek kölcsönhatási energiája:

$$\mathbf{H}_{\text{int}} = -\frac{e}{mc} (\mathbf{v} \cdot \mathfrak{A}). \quad (1,1)$$

Ez a kölcsönhatási energia perturbációként fogható fel, mely átmenetet hoz létre a perturbációmentes rendszer (atomi rendszer + sugárzási tér) két állapota között. Az átmenet általában az atomi rendszer kvantumállapotának a változásából és egy foton abszorpciójából, ill. emissziójából áll. Itt  $e$  és  $m$  az atomi rendszer elektronjainak töltése, ill. tömege,  $\mathbf{v}$  a sugárzásos átmenetért felelős elektron sebessége, végül  $\mathfrak{A}$  a sugárzási tér vektorpotenciálja.

Az ismert módszer segítségével megmutatható [6], hogy az atomi rendszerek két nem-degenerált állapota ( $E_a < E_b$ ) közti átmenet esetén, ha az indukált emisszió elhanyagolható, dipolsugárzásnál az abszorpció, ill. az emissziós spektrum a következő alakba írható [5]:

$$\alpha(\omega) = \Im \mathfrak{N}(\omega) \frac{4\pi^2}{c} \omega |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) \quad (1,2)$$

és

$$\varepsilon(\omega) = \frac{4}{3} n^2 \omega \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2 \delta(E_b - E_a + \hbar\omega), \quad (1,3)$$

ahol  $\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle = e \langle a | \mathbf{r} | b \rangle$  az átmeneti dipólmomentumnak: a  $b \rightarrow a$  átmenethez tartozó mátrixeleme, és  $\Im$  az egységnyi térfogatban levő abszorbeáló atomi rendszerek száma.



Ha a fluoreszcens molekulák abszorpciós és emissziós spektrumát vizsgáljuk, sokkal bonyolultabb problémával van dolgunk, mint a fenti speciális esetben. A felerősítő problémák nemcsak arra vezethetők vissza, hogy

- (i) a molekulák kvantumállapotai erősen degeneráltak és így a korrespondencia elv már nem alkalmazható (vagy legalábbis kétséges, hogy a klasszikus sugárzáselmélet alapján álló okoskodások, ill. analógiák használhatók lennének);
- (ii) a fluoreszkáló molekulák el nem hanyagolható kölcsönhatásban állnak az oldószer molekuláival,

hanem a fluoreszkáló molekulák bonyolult szerkezetével is kapcsolatosak.

A fluoreszcens molekulák elmélete exaktul nem alapozható meg, és megfelelő közelítő módszer sem dolgozható ki, még a modern kvantumkémia módszereivel sem. Mindazonáltal, a fluoreszcenciára vonatkozó igen kiterjedt kísérleti vizsgálatok alapján [7, 8], éppen a fluoreszcens molekulák szerkezetének a bonyolult volta lehetővé teszi, hogy a molekulák szerkezetére és spektrumára vonatkozóan olyan kézenfekvő feltevésekkel éljünk, amelyek alapján az abszorpciós és emissziós spektrum általános törvényszerűségei megállapíthatók; továbbá, amelyek alapján megfontolásaink érvényességi határa is megbecsülhető.

A molekulák Hamilton-operátora formálisan a következőképpen írható fel:

$$\mathbf{H}^{(m)} = \mathbf{H}_{\text{el}}^{(m)} + \mathbf{H}_v^{(m)} + \mathbf{H}_{\text{int}}^{(m)}, \quad (1,4)$$

ahol  $\mathbf{H}_{\text{el}}^{(m)}$  és  $\mathbf{H}_v^{(m)}$  a molekula Hamilton-operátorának az elektronoktól, ill. az atomi rezgésektől függő része és  $\mathbf{H}_{\text{int}}^{(m)}$  a köztük levő kölcsönhatás operátora. (1,4) nyilvánvaló módon a Hamilton-operátor szokásos felbontása.

Amint arra számos kutató felhívta már a figyelmet az abszorpciós és emissziós spektrumok kísérleti sajátosságainak tanulmányozása alapján, a fluoreszcens molekulák elsősorban a  $\mathbf{H}_v^{(m)}$  operátor szerkezetében különböznek a két- és az egyszerűbb több-atomos molekuláktól. Az utóbbi esetben ugyanis a harmonikus közelítés kielégítő az atomi rezgések tárgyalásánál. Ez azt jelenti, hogy a molekularezgések egymással kölcsönhatásban nem álló normálrezgések szuperpozíciójának tekinthetők. Fluoreszcens molekulák esetében azonban a harmonikus közelítés már nem alkalmazható, és fel kell tételeznünk, hogy a normálrezgések erős kölcsönhatásban vannak egymással; elannyira, hogy valamelyik normálrezgés által elnyelt energia igen gyorsan disszipálódik a rezgési szabadsági fokok között. Ebből a megfontolásból következik, hogy az energiaceloszlás a rezgési szabadsági fokokon függetlennek tekinthető a molekula különböző elektronállapotaiban, vagy legalábbis a két legalsó energianívó esetében, amelyek a fluoreszcenciánál szerepet játszanak. Figyelembe véve a fluoreszcens molekulák kémiai szerkezetét, kézenfekvőnek látszik az a feltevés is, hogy a rezgési nívók olyan közel fekszenek egymáshoz, hogy a rezgési spektrum kvázi-folytonosnak tekinthető.

A Hamilton-operátor kölcsönhatási része a molekula elektronrendszere és az atomi rezgések közti kölcsönhatást írja le. Ily módon szerepel benne egy csatolási állandó, melynek nagysága e két lényegesen különböző szabadsági fok közti kölcsönhatás erősségére jellemző.

Még ha nem is kívánunk arra törekedni, hogy valamilyen explicit kifejezést javasoljunk a  $\mathbf{H}_{\text{int}}^{(m)}$  operátorra, annyi mindenesetre feltételezhető, hogy az abszorbeált  $\hbar\omega$  energiának egy része — mondjuk  $\hbar\omega_0$ , mely éppen az elektronállapotok



energiájának a különbsége — az elektronrendszert gerjeszti és a visszamaradó rész:  $\hbar(\omega - \omega_0)$ , a rezgési szabadsági fokokon disszipálódik. Ugyanis, a disszipálódott energia nagysága a  $\mathbf{H}_{\text{int}}^{(m)}$  operátorban szereplő csatolási állandótól függ, mely az egyes fluoreszcens molekulák jellemző állandója. Tekintettel arra, hogy az atomi rezgések tehetetlensége sokkal nagyobb, mint az elektronrendszeré, feltételezhető (legalábbis a spektrum Stokes-féle tartományában), hogy  $\hbar(\omega - \omega_0) \ll \hbar\omega_0$ . Legegyen szabad azonban határozottan rámutatni arra, hogy a rezgési nívókon disszipálódott energia várható értéke végső soron az egész molekula kvantumállapotától függ és kissé ingadozik, ha a rendszer állapotának az időbeli változását figyelembe vesszük. Valóban, látni fogjuk, hogy ennek a fluktuációnak a figyelembe vételére szükség lesz, amikor a *Dombi* és *munkatársai* által kísérletileg megállapított (0,3) alatti abszorpciós spektrum analitikus alakját származtatni akarjuk.

Fényemisszió esetében a fluoreszcens molekula által kibocsátott fény  $\hbar\omega$  energiájának egy része (mondjuk  $\hbar\omega_0$ ) az elektronrendszer két tekintetbejövő kvantumállapota közti energiakülönbségre vezethető vissza, és ehhez hozzáadódik  $\hbar(\omega - \omega_0)$  energia, mely a rezgési nívók állapotváltozásával kapcsolatos. Természetesen a megfelelő fluktuációs effektust ebben az esetben is figyelembe kell venni.

Ezen a helyen talán hasznos lesz, ha egy jól ismert analógiára hivatkozunk, mely atomok abszorpciós és emissziós folyamatainál fontos szerepet játszik. Ha az atomok mozgását is figyelembe vesszük a sugárzási térrel való kölcsönhatás alkalmával, az abszorbeált, ill. emittált energia egy részét az atom kinetikai energiája felemészti vagy növeli. A sugárzási energiának ez a transláció „mechanikai szabadsági fokokon” való disszipációja, ill. a tőlük származó növekedése, ha  $\hbar\omega$  eléggé jelentős, a spektrumvonalak kiszélesedésében, az abszorpciós és emissziós spektrumok maximumának szétválasztódásában és tükrörszimmetriájukban nyilvánul meg. Ilyen effektus a nehéz fluoreszcens molekulák esetében teljesen elhanyagolható, azonban az abszorpciós és emissziós spektrumok tükrörszimmetriájában a rezgési mechanikai szabadsági fokokon való hasonló energiadisszipáció, ill. e szabadsági fokoktól származó energianövekedés jelentkezik, és szemléletesen érthetővé teszi a spektrumok tükrörszimmetriáját.

Az egyszerűség kedvéért vizsgáljuk a sugárzásos átmeneteket a fluoreszcens molekula két — egymástól  $\hbar\omega_0$  távolságra levő — legalacsonyabb elektronállapota között, és tegyük fel, hogy ezek az elektronállapotok nem-degeneráltak. Ismeretes, hogy általában a fluoreszcencia elméletében eme feltevésekkel szokás élni. Ez azt jelenti, hogy a molekula megfelelő állapotainak a degenerációja csak a rezgési állapotokra vezethető vissza. Jelöljük a legmélyebb elektronállapotot  $E_0$ -val, a molekula megfelelő állapotát  $E_a$ -val, továbbá a magasabb kvantumállapotot  $E_b$ -vel, akkor

$$E_a = E_0 + W_a \quad \text{és} \quad E_b = E_0 + \hbar\omega_0 + W_b, \quad (1,5)$$

ahol  $W_a$ , ill.  $W_b$  a megfelelő rezgési nívók energiája. Az energia megmaradási tétele alapján  $a \rightarrow b$  átmenet esetén az abszorbeált foton energiájának ki kell elégítenie az

$$E_b - E_a = \hbar\omega \quad (1,6)$$

összefüggést, és közvetlenül belátható, hogy

$$W_b - W_a \equiv \hbar\omega_{ba} = \hbar(\omega - \omega_0). \quad (1,7)$$



A megfelelő ket-vektorok kielégítik az időtől független Schrödinger-egyenletet:

$$\mathbf{H}^{(m)}|a\rangle = E_a|a\rangle \quad \text{és} \quad \mathbf{H}^{(m)}|b\rangle = E_b|b\rangle, \quad (1,8)$$

és függenek mind az elektronok koordinátáitól ( $r_i$ ), mind pedig az atomi rezgések normál-koordinátájától ( $q_r$ ). Hangsúlyoznunk kell, hogy az elektronok és az atomi rezgések közti kölcsönhatás miatt, e koordináták nem szeparálhatók, tehát a ket-vektorok nem állíthatók elő két olyan függvény szorzataként, melyek csak az elektronkoordinátáktól, ill. csak a normál-koordinátáktól függenek. Ezért nem érthetünk egyet *Sztyepanov*-val, aki kitűnő monográfiájában [8], pl. a tükörszimmetria-törvény levezetésénél egyszerűsítésképpen bevezetett ilyen szeparációt.

Reális kísérleti körülmények között fluoreszcens molekulák egy rendszerével találkozunk, amelyek általában idegen molekulák közé vannak beágyazva gőz, folyékony és szilárd halmazállapotban egyaránt. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a fluoreszcens és az idegen molekulák csak termikus kölcsönhatásban állnak egymással. Első pillanatra talán meglepőnek látszik, de úgy tűnik, hogy ritka oldatok fluoreszcenciája esetén legegyszerűbb a helyzet elméleti szempontból. Ez talán azzal indokolható, hogy ritka oldatok esetén — legalábbis abban az esetben, ha a fluoreszcens molekulák közt elég a sugárzásmentes energiaátadást figyelembe venni — a fluoreszcens molekulák nem állnak közvetlen (még termikus kölcsönhatásban sem) egymással. Ugyanis, a fluoreszcens molekulák száma elhanyagolható az oldószer molekuláinak számához képest, tehát gyakorlatilag nem ütköznek egymással. Ez azt jelenti azonban, hogy a fluoreszcens molekulák összessége — mint az oldat egy komponens-rendszere — statisztikai szempontból az oldószer-molekulák hőfürdőjében levő ideális gáznak tekinthető, tekintettel arra, hogy éppen a kölcsönhatás hiánya az ideális gáz definíciójának leglényegesebb pontja. Ilyen körülmények között a fluoreszcens molekulák összessége Gibbs-féle sokasággal reprezentálható és így az  $E_n$  állapotban levő molekulák száma arányos  $\exp\{(\Psi_n - E_n)/\theta\}$ -val, ahol  $\Psi_n$  az  $E_n$  állapotú molekulák szabad energiája  $\theta$  hőmérsékleten, továbbá a fluoreszcens molekulák és az oldószer közti kölcsönhatás figyelembe vehető a hővezetés fenomenológiai módszerének a segítségével. Gőzöknél ezen túlmenően lényeges szerepet játszik a diffúzió és szilárd halmazállapotban a szilárd test fonon-gerjesztése, ami bizonyos szempontból bonyolultabbá teszi a helyzetet.

Amennyiben a kísérletileg meghatározható spektrumot akarjuk elméletileg számítani, akkor — pl. az abszorpciós spektrum esetében — az (1,2) alatti formulát átlagolni kell minden lehetséges rezgési állapotra, az alap- és gerjesztett állapotban egyaránt, és meg kell szoroznunk az alapállapotban levő molekulák számával. Feltételezve, hogy alapállapotban a molekulák valamilyen  $\theta_1$  hőmérsékleten termikus egyensúlyban vannak a környezetükkel (tehát az oldószer molekuláival), ez azt jelenti — amint azt egyébként *Blohincev* [5] részletesen elemezte —, hogy alapállapotban még átlagolnunk kell a statisztikai sokaságra is, tehát a

$$\sum_a \sum_b \exp\{(\Psi_1 - E_a)/\theta_1\} g(E_a) g(E_b) |\langle a|\mathfrak{D}|b\rangle|^2 = \quad (1,9)$$

$$= \int dW_a \int dW_b \exp\{(\Psi_1 - E_a)/\theta_1\} g(E_a) g(E_b) F(E_a, E_b)$$

kifejezést kell meghatározoznunk, ahol  $\Psi_1$  a molekulák szabad energiája az alap-



állapotban;  $g(E_a)dW_a$  és  $g(E_b)dW_b$  a vibrációs energianívók száma az  $(E_0 + W_a, E_0 + W_a + dW_a)$  ill.  $(E_0 + \hbar\omega_0 + W_b, E_0 + \hbar\omega_0 + W_b + dW_b)$  energiatartományokban, végül  $F(E_a, E_b) \equiv F(E_a, E_a + \hbar\omega)$  az átmeneti mátrixelem négyzete  $a \rightarrow b$  átmenet esetén. Az összegezést azért helyettesíthetjük integrálással, mert a rezgési nívók olyan közel helyezkednek el egymáshoz, hogy a vibrációs spektrumot jó közelítéssel kvázi-folytonosnak tekinthetjük.

Ismeretes, hogy ez a módszer — amely jól ismeretes a spektroszkópiában — atomok és egyszerűbb többatomos molekulák esetén igen jól megadja az abszorpciós és az emissziós spektrumot. Sőt e módszer felhasználásával Blohincev [5] le tudta vezetni az abszorpciós és emissziós spektrumok tükrösszimmetria-törvényét is.

Mindazonáltal úgy tűnik, hogy fluoreszcens molekulák esetében ez a módszer kissé módosítandó. Nevezetesen: részint az elektronok és a molekularezgések közti, részint pedig a rezgési szabadsági fokok közti erős kölcsönhatások, amelyeket  $\mathbf{H}_{\text{int}}^{(m)}$  és  $\mathbf{H}_v^{(m)}$  explicit ismerete hiányában nem ismerünk, szükségessé teszik, hogy valamilyen konkrétabb feltevéssel éljünk arra vonatkozóan, hogy  $\hbar\omega$  energiájú foton abszorpciója esetén mekkora és hogyan oszlik meg a rezgési szabadsági fokok közt a molekularezgéseket gerjesztő  $\hbar(\omega - \omega_0)$  energia. Minthogy a molekularezgéseket gerjesztő energia különböző fázisban érheti az egyes rezgési formákat, és ily módon egyaránt növelheti vagy fékezheti az egyes  $W_b$  energiákhoz tartozó rezgéseket, minden okunk megvan annak a feltételezésére, hogy egy adott  $E_a$  energiájú kezdeti állapotból egyenlő valószínűséggel elérhető akármelyik  $E_b$  energiájú állapot. Természetesen a gerjesztett állapotba jutó molekulák száma az átmenet eme bizonytalanságától nem függhet, ezért minden egyes  $a$  állapotból kiinduló gerjesztés esetén a  $b$  állapotokra is képeznünk kell a statisztikai sokaságra vett átlagot, azaz szoroznunk kell a  $b$  állapotokra való összegezés előtt egy  $\exp\{(\Psi_2 - E_b)/\theta_2\}$  faktorról, ahol  $\Psi_2$  a molekulák szabad energiája a gerjesztett állapotban. Itt  $\theta_1$  helyett valamilyen  $\theta_2$  hőmérsékletet írtunk, mert a rezgési szabadsági fokok gerjesztődése miatt a fluoreszcens molekulák „felmelegsznek” és így  $\theta_2 > \theta_1$  hőmérsékleten lesznek termikus egyensúlyban. Ily módon tehát a Blohincev által megadott (1,9) alatti kifejezés helyett a

$$\sum_a \sum_b \exp\{(\Psi_1 - E_a)/\theta_1\} \exp\{(\Psi_2 - E_b)/\theta_2\} g(E_a)g(E_b) |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2 = \quad (1,10)$$

$$= \int dW_a \int dW_b \exp\{(\Psi_1 - E_a)/\theta_1\} \exp\{(\Psi_2 - E_b)/\theta_2\} g(E_a)g(E_b) F(E_a, E_b)$$

kifejezésből számítjuk az átmeneti valószínűséget.

Meg kell végül most állapítanunk a fentebb bevezetett  $\theta_1$  és  $\theta_2$  fiktív hőmérsékleti értékek kapcsolatát az oldat  $\theta$  hőmérsékletével, ill. a termikus egyensúlyban levő gerjesztett molekulák  $\theta^*$  hőmérsékletével. Kvalitatíve a következőképpen oszthatunk: A Hamilton-operátorban — a szokásnak megfelelően — csak az elektronoktól és a molekularezgésektől származó energiát vettük figyelembe, és elhanyagoltuk a molekulák translációs energiáját. Ámde akkor a Gibbs-féle sokaság exponenciális súlyfüggvényében  $E_a$  kisebb, mint alapállapotban a molekula energiája, ezért az  $E_a/\theta_1$  hányadosban a  $\theta_1$  hőmérsékletnek kisebbnek kell lennie, mint az oldat  $\theta$  hőmérséklete, hogy a hányados értéke ne változzék. Gerjesztett állapotban viszont a mechanikai szabadsági fokokra, jutó energiát — a kinetikai



energia elhagyása miatt — csupán a rezgési szabadsági fokok közt „osztottuk fel” és így több energia jutott a rezgési szabadsági fokokra mint a valóságban, ezért hogy az  $E_b/\theta_2$  hányados értéke ne változzék, a  $\theta_2$  hőmérsékletnek nagyobbnak kell lennie, mint a gerjesztett állapotban levő molekulák  $\theta^*$  hőmérsékletének. Egyelőre tehát csak annyit állapíthatunk meg, hogy  $\theta_1 < \theta < \theta^* < \theta_2$ . A kvantitatív összefüggést a következő paragrafusban [1. (2,12)] fogjuk megállapítani.

A fluoreszcencia spektrum számításánál, azaz fényemisszió alkalmával, teljesen hasonlóan okoskodhatunk. Az egyedüli különbség az, hogy ebben az esetben a  $b$  indexszel jelölt állapotból, a gerjesztett állapotból, indul el a sugárzási átmenet, tehát a  $\theta_1$  és  $\theta_2$ , ill. a  $\theta$  és  $\theta^*$  hőmérsékletek szerepe felcserélődik, hiszen a spontán átmenet előtt a  $b$  állapotban vannak a molekulák a környezetükkel termikus egyensúlyban és az alapállapotban marad vissza a molekula rezgési szabadsági fokain főlős energia. Ebben az esetben megegyezik a formulánk az (1,10) alatti kifejezéssel, csupán az  $E_a$  és  $E_b$  energiaértékeket kell felcserélnünk.

Végül a fluoreszcens molekulák elektronjainak és atomi rezgéseinek a kölcsönhatásánál fellépő fluktuáció miatt, amikor (1,10) alatti kifejezésünket alkalmazni akarjuk, figyelembe kell venni a rendszer időbeli állapotváltozása során fellépő időkorrelációs effektust is, amint azt a következő paragrafusban részletezzük.

## 2. §. A fluktuáló átmeneti dipólmomentum négyzetének átlaga

Az átmeneti dipólmomentum négyzetének az átlagát számítva, szükségünk van mátrixelemére Heisenberg-reprezentációban:

$$\begin{aligned} \langle a | \mathfrak{D}(t) | b \rangle &= \left\langle a \left| \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}^{(m)} t \right\} \mathfrak{D} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}^{(m)} t \right\} \right| b \right\rangle = \\ &= \langle a | \mathfrak{D} | b \rangle \exp \{ i(E_a - E_b)t/\hbar \} = \langle a | \mathfrak{D} | b \rangle \exp \{ i(\omega_{ab} - \omega_0)t \} \end{aligned} \quad (2,1)$$

ill. Fourier-amplitúdójára:

$$\begin{aligned} \langle a | \mathfrak{D}(\omega) | b \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle a | \mathfrak{D}(t) | b \rangle e^{i\omega t} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle a | \mathfrak{D} | b \rangle e^{i(\omega - \omega_0 + \omega_{ab})t} = \\ &= \langle a | \mathfrak{D} | b \rangle \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{ab}). \end{aligned}$$

A  $\mathfrak{D}(t)$  és  $\mathfrak{D}(t')$  operátorok különböző időpillanatokban általában nem cserélhetők fel, ezért a megfelelő idő-korrelációs függvényt a következőképpen kell definiálnunk [9]:

$$\Phi(t' - t) = \frac{1}{2} \{ \overline{\mathfrak{D}(t)\mathfrak{D}(t')} + \mathfrak{D}(t')\mathfrak{D}(t) \}, \quad (2,3)$$

ahol a felülhúzás a kvantumállapotokra vonatkozó átlagolást jelenti. Figyelembe véve a Fourier-transzformáció inverziós képletét

$$\mathfrak{D}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathfrak{D}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (2,4)$$

és kapjuk, hogy

$$\Phi(t' - t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \{ \overline{\mathfrak{D}(\omega) \mathfrak{D}(\omega')} + \mathfrak{D}(\omega') \mathfrak{D}(\omega) \} e^{-i(\omega t + \omega' t')}. \quad (2,5)$$

A jobb oldalon álló kifejezés csak akkor lesz csupán a  $(t' - t)$  időkülönbség függvénye, ha az integrandusz tartalmaz egy  $\delta(\omega + \omega')$  faktort, ezért az átmeneti dipólmomentum négyzetének az átlagát a következőképpen értelmezzük:

$$\frac{1}{2} \overline{\{ \mathfrak{D}(\omega) \mathfrak{D}(\omega') + (\omega') \mathfrak{D}(\omega) \}} \equiv \mathfrak{D}_{\omega}^2 \delta(\omega + \omega'). \quad (2,6)$$

Minthogy

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \overline{\{ \mathfrak{D}(\omega) \mathfrak{D}(\omega') + \mathfrak{D}(\omega') \mathfrak{D}(\omega) \}} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_n \sum_m \langle n | \mathfrak{D}(\omega) | m \rangle \langle m | \mathfrak{D}(\omega') | n \rangle + \langle n | \mathfrak{D}(\omega') | m \rangle \langle m | \mathfrak{D}(\omega) | n \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_n \sum_m |\langle n | \mathfrak{D} | m \rangle|^2 \{ \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{nm}) \delta(\omega' - \omega_0 - \omega_{mn}) + \\ & \quad + \delta(\omega' - \omega_0 + \omega_{nm}) \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{mn}) \} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_n \sum_m |\langle n | \mathfrak{D} | m \rangle|^2 \{ \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{nm}) + \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{mn}) \} \delta(\omega + \omega'), \end{aligned} \quad (2,7)$$

kapjuk, hogy

$$\mathfrak{D}_{\omega}^2 = \frac{1}{2} \sum_n \sum_m |\langle n | \mathfrak{D} | m \rangle|^2 \{ \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{nm}) + \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{mn}) \}. \quad (2,8)$$

Végül a kvantummechanikai átlagképzés mellett, meg kell határoznunk a statisztikai sokaságra vett átlagot is:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_a \sum_b \exp \left\{ \frac{\Psi_1 - E_a}{\theta_1} \right\} \exp \left\{ \frac{\Psi_2 - E_b}{\theta_2} \right\} |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2 \{ \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{ab}) + \\ & \quad + \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{ba}) \} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_a \sum_b \exp \left\{ \frac{\Psi_1 - E_a}{\theta_1} \right\} \exp \left\{ \frac{\Psi_2 - E_b}{\theta_2} \right\} \left[ 1 + \exp \left\{ - (W_b - W_a) \left( \frac{1}{\theta_1} - \frac{1}{\theta_2} \right) \right\} \right] \times \\ & \quad \times |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_0 + \omega_{ab}) = \\ &= \exp \left\{ - \frac{\varkappa \hbar (\omega - \omega_0)}{2\theta_1} \right\} \cosh \left\{ \frac{\varkappa \hbar (\omega - \omega_0)}{2\theta_1} \right\} \sum_a \sum_b \exp \left\{ \frac{\Psi_1 - E_a}{\theta_1} \right\} \exp \left\{ \frac{\Psi_2 - E_b}{\theta_2} \right\} \cdot \\ & \quad \cdot |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2, \end{aligned} \quad (2,9)$$

ahol

$$\varkappa = \frac{\theta_2 - \theta_1}{\theta_2}. \quad (2,10)$$



Amde akkor (1,10) alatti egyenletünk a következő alakba írható:

$$\begin{aligned} \sum_a \sum_b \exp \left\{ \frac{\Psi_1 - E_a}{\theta_1} \right\} \exp \left\{ \frac{\Psi_2 - E_b}{\theta_2} \right\} g(E_a) g(E_b) |\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2 = \\ = \exp \left\{ \frac{\Psi_1}{\theta_1} + \frac{\Psi_2}{\theta_2} + \frac{\kappa \hbar (\omega - \omega_0)}{2\theta_1} \right\} \cosh^{-1} \left\{ \frac{\kappa \hbar (\omega - \omega_0)}{2\theta_1} \right\} \times \\ \times \int dW_a \int dW_b e^{-E_a/\theta_1} e^{-E_b/\theta_2} g(E_a) g(E_b) F(E_a, E_b). \end{aligned}$$

Behelyettesítve ezt az eredményt (1,2) alatti egyenletünkben  $|\langle a | \mathfrak{D} | b \rangle|^2$  helyére, az aktív abszorpciós spektrumra kapjuk, hogy

$$\alpha_{\text{act}}(\omega) = \alpha'_0 n(\omega) \omega \exp \left\{ \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{2\theta^*} \right\} \cosh^{-1} \left\{ \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{2\theta} \right\} \mathfrak{S}_a(\omega - \omega_0), \quad (2,12)$$

ahol

$$\theta^* \equiv \theta_1/(3\kappa - 2), \quad \theta \equiv \theta_1/\kappa = (3\kappa - 2)\theta^*/\kappa, \quad (2,13)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_a(\omega - \omega_0) \equiv \int dW_a \exp \left\{ \frac{(\kappa - 2)W_a}{\theta_1} \right\} g(E_0 + W_a) g(E_0 + \hbar\omega_0 + W_a + \hbar(\omega - \omega_0)) \times \\ \times F(E_0 + W_a, E_0 + W_a + \hbar\omega_0 + \hbar(\omega - \omega_0)). \end{aligned} \quad (2,14)$$

A (2,12) egyenletben szereplő  $\alpha'_0$  állandó tartalmazza mindazokat az (1,2) és (2,11) egyenletből származó szorzótényezőket, melyek függetlenek  $\omega$ -tól.

Hasonlóképpen az emissziós spektrum esetében

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'_0 n^3(\omega) \omega^3 \exp \left\{ -\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{2\theta^*} \right\} \cosh^{-1} \left\{ \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{2\theta} \right\} \mathfrak{S}_\varepsilon(\omega - \omega_0), \quad (2,15)$$

ahol

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_\varepsilon(\omega - \omega_0) \equiv \int dW_b \exp \left\{ \frac{(\kappa - 2)W_b}{\theta_1} \right\} g(E_0 + W_b + \hbar(\omega - \omega_0)) \times \\ \times g(E_0 + \hbar\omega_0 + W_b) F(E_0 + W_b + \hbar(\omega - \omega_0), E_0 + \hbar\omega_0 + W_b). \end{aligned} \quad (2,16)$$

A (0,3) és (2,12), ill. a (0,4) és (2,15) alatti egyenletek összehasonlítása céljából tanulmányoznunk kell az  $I_x(\omega - \omega_0)$  és  $I_s(\omega - \omega_0)$  integrálokat.

### 3. §. Az abszorpciós és emissziós spektrumok közti általános összefüggések

Figyelembe véve az előző paragrafusban meghatározott abszorpciós és emissziós spektrumokat, a következő fontos összefüggést állapíthatjuk meg:

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\alpha_{\text{act}}(\omega)} = \frac{\varepsilon'_0}{\alpha'_0} n^2(\omega) \omega^2 \exp \left\{ -\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\theta^*} \right\} \frac{\mathfrak{S}_\varepsilon(\omega - \omega_0)}{\mathfrak{S}_a(\omega - \omega_0)}. \quad (3,1)$$

Ez nem más, mint a Sztjepanov-féle sugárzási törvény egy újabb általánosítása.

Sajnos ez az összefüggés csupán implicit alakban tartalmazza a sugárzási törvényt, mert az (1,8) alatti Schrödinger-egyenlet megoldását, és ezzel együtt az  $F(E_a, E_b)$  függvényt, továbbá a  $g(E_a)$  és  $g(E_b)$  függvényeket nem ismerjük, így az integráljainkat explicite nem tudjuk kiszámítani.

Mindazonáltal részint észrevesszük, hogy

$$\varepsilon(\omega_0)/\alpha_{\text{act}}(\omega_0) = \frac{\varepsilon'_0}{\alpha_0} n^2(\omega_0) \omega_0^2, \quad (3,2)$$

részint pedig az

$$\varepsilon_0 \equiv \varepsilon'_0 \exp \{ -\hbar \omega_0 / 2\theta^* \} \mathfrak{F}_\varepsilon(\omega - \omega_0) \approx \varepsilon'_0 \exp \{ -\hbar \omega_0 / 2\theta^* \} \mathfrak{F}_\varepsilon(0) \quad (3,3)$$

$$\alpha_0 \equiv \alpha'_0 \exp \{ +\hbar \omega_0 / 2\theta^* \} \mathfrak{F}_\alpha(\omega - \omega_0) \approx \alpha'_0 \exp \{ +\hbar \omega_0 / 2\theta^* \} \mathfrak{F}_\alpha(0)$$

rövidítések bevezetésével láthatjuk, hogy (3,1) éppen a (0,1) alatti általánosított Sztjepanov-féle sugárzási törvény, abban a formában, ahogy *Ketskémty és munkatársai* [4] kísérletileg igazolták, legalábbis egy szűk, de gyakorlatilag eléggé nagy  $(\omega_0 - \omega, \omega_0 + \omega)$  frekvenciaintervallumra. Ily módon elfogadható *Blohincev* [5] ama feltevése, hogy valahányszor  $\hbar(\omega - \omega_0)$  elhanyagolható  $E_0$  mellett, az integranduszok  $\omega$  lassan változó függvényei; pontosabban

$$\mathfrak{F}_\varepsilon(\omega \mp \omega_0) \approx \mathfrak{F}_\varepsilon(\omega \pm \omega_0), \quad \text{ha} \quad \hbar|\omega - \omega_0| \ll \overline{E(2\theta)}, \quad (3,4)$$

ahol  $\overline{E(2\theta)}$  a molekula átlagos energiája  $2\theta$  hőmérsékleten. Megjegyezzük, hogy ez a frekvenciaintervallum közelítőleg megegyezik azzal a frekvenciatartománnyal, ahol az abszorpciós és emissziós spektrumok átfedik egymást.

Végül (3,4) alapján közvetlenül belátható, hogy

$$[\alpha_{\text{act}}(\omega)/n(\omega)\omega]_{\omega \pm \omega_0} = \text{konst.} [\varepsilon(\omega)/n^3(\omega)\omega^3]_{\omega \mp \omega_0}. \quad (3,5)$$

Minthogy a tapasztalat szerint a számításba jövő frekvenciaintervallumban  $n(\omega) \approx \text{konst.}$ , a (3,5) alatti összefüggés éppen a *Ljovsin*-féle tükőrszimmetria törvény analitikus alakja.

#### 4. §. Összefoglaló megjegyzések

A javasolt elmélet lényeges feltevése volt az, hogy abszorpció esetében az abszorbeált energia egy része, ill. emisszió esetében az emittált energia visszamaradó része növeli a molekula rezgési energiáját. Azonban meggondolásunk — amint azt (2,13) alapján közvetlenül beláthatjuk — csak akkor fogadható el, ha  $\kappa > 2/3$ , hiszen a hőmérséklet előjele nem változhatik meg. Használva *Dombi és munkatársai* [2] mérési adatait, a (2,13) és (2,10) alatti egyenletekkel meghatározott hőmérsékleti értékeket az 1. táblázatban foglaltuk össze. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy *Dombi és munkatársai* az  $A$  és  $B$  paraméterek meghatározása alkalmával, a  $B$  paraméter értékét rögzítették és igyekeztek arra, hogy azt az  $A$  értéket határozzák meg, amely esetében a számított és a mért abszorpciós és emissziós görbe a legjobban összeesik. A fenti meggondolásból azonban kitűnik, hogy az  $A$  paraméter értékét kell rögzíteni, hiszen ez tartalmazza az oldat  $\theta$  hőmérsékletét. Ezért a  $B$  paraméter variálásával újraszámítottuk a paramétereket jó egyezésben az ő eredményeikkel. Az 1. táblázat a mi számításunknak megfelelő hőmérsékleti értékeket tartalmazza.



1. TÁBLÁZAT

	$T$ °K	$T^*$ °K	$\frac{C \text{ Cal}}{\text{grad. g}}$	$\tau$ $10^{-9}\text{s}$	$T_f^*$ °K	$\tau^*$ $10^{-9}\text{s}$
Fluorescein	298,1	377,7	0,323	5,05	331	8,55
Rhodamine B	298,1	407,2	0,033	5,6	332,6	6,89
Trypaflavine	298,1	396,2	0,186	4,0	325,6	4,70

Probléma lehet azonban, hogy a bevezetett  $\theta^*$  hőmérsékletnek van-e kísérleti realitása? Természetesen  $\theta^*$  közvetlenül nem mérhető. Ha azonban a fenti megfontolás elfogadható és a  $\hbar(\omega - \omega_0)$  energia valóban hővé alakul át, érvényes a

$$T^* - T = \frac{\gamma \hbar (\omega - \omega_0) N}{MC} \quad (4,1)$$

összefüggés (ahol  $N = 6,02486 \cdot 10^{23} \text{ (g} \cdot \text{mol)}^{-1}$ ,  $\gamma = 4,184 \cdot 10^{-8} \text{ cal/erg}$ ;  $M$ , ill.  $C$  a molsúly, ill. rezgési fajhő) és az ismeretlen rezgési fajhő meghatározható. Valóban, *Dombi és munkatársai* [2] mérési adatait felhasználva meghatároztuk a  $T^*$  hőmérsékletet, amely a molekulák elektronjainak és atomi rezgéseinek a kölcsönhatásától függ, és kiszámítottuk a fajhőt. Az eredmények az 1. táblázatban láthatók és jól megegyeznek *Borissevich* [10] adataival, ill. *Kozma, Szalay és Hevesi* [11] becsléseivel.

További ellenőrzésül szolgálhat az alábbi megfontolás. Minthogy a  $\theta^*$  hőmérsékletű gerjesztett molekulák, mint egy komponens-rendszer, termikus kölcsönhatásban vannak a  $\theta$  hőmérsékletű oldószer molekulákkal, alkalmazva *De Groot* módszerét [11], írhatjuk, hogy

$$\frac{d}{dt} \Delta T = -\frac{1}{\tau^*} \Delta T, \quad (\Delta T \equiv T^* - T) \quad (4,2)$$

ahol  $\tau^*$  a kölcsönhatás relaxációs ideje. Ámde akkor

$$\Delta T(\tau) = \Delta T(0) \exp \{ -\tau/\tau^* \}, \quad (4,3)$$

ahol  $\Delta T(0)$  a  $t=0$  időpillanatban (tehát a gerjesztés pillanatában) és  $\Delta T(\tau)$  a  $t=\tau$  időpillanatban (tehát az emisszió pillanatában) jelenti a gerjesztett állapotban levő molekulák és az oldat hőmérsékletének a különbségét. Mi meghatároztuk a  $T^*$  hőmérsékletet a gerjesztés pillanatában, tehát ismeretes  $\Delta T(0)$ . Felhasználva tehát a fluorimetrikusan mért [12]  $\tau$  csillapodási időt és a  $\Delta T(\tau) = T_f^* - T$  hőmérséklet-különbséget, kiszámítható a  $\tau^*$  relaxációs idő. Eredményeinket az 1. táblázat tartalmazza.  $\tau^*$  jó közelítéssel megegyezik a dielektromos relaxációs idővel, valamint *Kozma és munkatársai* [11] becsléseivel. Az itt bevezetett és a dielektromos relaxációs idő nagyságrendi megegyezése érthető, hiszen mindkét folyamat gyenge termikus kölcsönhatás eredménye.

Őszinte köszönettel tartozom *Ketskemény Istvánnak*, aki volt olyan szíves, hogy a problémára felhívta a figyelmemet, továbbá *Szalay László, Dombi József és Kozma László* kollegáimnak az értékes diszkuszióért, valamint azért, hogy kísérleti eredményeiket közlés előtt rendelkezésemre bocsátották.

## IRODALOM

- [1] Szalay L., Hevesi J., Kozma L., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 157, 1965.
- [2] Dombi J., Ketskemény J., Kozma L., Acta Phys. et Chem. Szeged 10, 15, 1964.
- [3] Sztjepanov, B. J., DAN USSR 112, 839, 1957; JAN USSR 22, 1367, 1958.
- [4] Ketskemény I., Dombi J., Horvai R., Ann. Phys. 7, 342, 1961.
- [5] Blohincev D., JEPT USSR 4, 459, 1939.
- [6] Heitler, W.: A sugárzás kvantumelmélete. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1959.
- [7] Wolkenstein, M. W.: Struktur und physikalische Eigenschaften der Moleküle. Teubner, Leipzig, 1960.
- [8] Степанов, Б. И. Люминесценция сложных молекул. Изд. АН БССР. Минск, 1956.
- [9] Landau, L. D., E. M. Lifshitz: Statistical Physics. Pergamon, London, 1958. 118. és 123. §§.
- [10] Borissevich, N. A., Acta Phys. et Chem. Szeged, 10, 9, 1964.
- [11] Kozma, L., Szalay, L., Hevesi, J., Acta Phys. et Chem. Szeged, 10, 67, 1964.
- [12] Hevesi, J.: (nem publikált mérések)



# A PAULI-ELV ÉS A LORENTZ-CSOPORT

RES JOST

## TÖRTÉNETI RÉSZ

### Bevezetés

Mióta a kvantumtérelmélet megszületett, ez volt Pauli munkásságának fő területe. Nemcsak saját munkáival járult hozzá döntő módon az elmélet kifejtéséhez, hanem azzal is, hogy állandóan figyelemmel kísérte és intenzíven tanulmányozta más kutatók munkáit, és kritikájával nagy hatást gyakorolt rájuk. Nem túlzás, ha azt mondjuk, hogy Pauli volt a térelmélet megszemélyesített lelkiismerete.

Különösen sokat foglalkoztatta a speciális relativitáselmélet és a kvantumelmélet követelményeinek összeegyeztetése. Ismeretes, hogy ezen követelmények összeolvasztása egy ellentmondásoktól mentes elméletben (4 dimenzióban) olyan probléma, melynek megoldása eddig egyetlen modellben sem sikerült nemtriviális módon. Mégis, a kérdés beható tanulmányozása egészen váratlanul új felfedezésre vezette *Paulit*, s felfedezése közvetlenül kapcsolódott 1925-ből származó nagy eredményéhez, a kizárási elvhez. A *spin* és a *statisztika* összefüggésére gondolunk itt, vagyis arra a tételre, mely szerint egy relativisztikus elméletben, amely eleget tesz a kvantumelmélet szokásos feltevéseinek, a feles spinű részecskék a kizárási elv szerint viselkednek, az egész spinű részecskék pedig a Bose—Einstein statisztikát követik.

A történeti részben először áttekintjük *Pauli* korábbi térelméleti munkáit a vizsgált kérdés szempontjából. Ezután sorra vesszük azt a tekintélyes számú dolgozatot, melynek tárgya maga az említett tétel. Végül röviden érintünk még egy, a fenti témához közelálló kérdéskört (CTP-tétel).

### 1. *Pauli* munkái a pozitron felfedezéséig

Ebbe a periódusba esik az a *Heisenberggel* közösen írt két nagy munkája [1], melyekben először kristályosodik ki tisztán a rendszeres térelmélet.

Az előzmények a következők voltak: *Dirac* [2] 1927-ben elsőnek alkalmazta, mégpedig sikerrel, a kvantumelmélet elveit a Maxwell-féle térre, s ily módon eljutott a kvantált térelmélet első és legfontosabb modelljéhez. A tér kvantumai (a fotonok) itt a Bose—Einstein statisztikának tettek eleget. Ezért az egy elektront leíró Schrödinger-egyenletre a bevezetett kvantálási szabályokat nem lehetett alkalmazni; ezek ugyanis az elektronok esetében is Bose—Einstein statisztikára vezettek volna.

Ide kapcsolódnak *Jordan* [3] valamint *Jordan* és *Wigner* [4] munkái, amelyek megmutatják, hogy a tér Fourier-együtthatóira vonatkozó felcserélési összefüggések megfelelő módosítása olyan részecskékre vezet, melyek a kizárási elv szerint viselkednek. A módosítás abban áll, hogy a kommutátorokat antikommutátorokkal kell helyettesítenünk.

Ezzel az elmélet formális apparátusa már elérte azt a fejlődési fokot, amelyen felvetődhetett a kérdés: mi az összefüggés egy tér transzformációs tulajdonságai és a kvantálással bevezetett részecskék statisztikája között?

Ami azonban szempontunkból különösen fontos, az *Jordan és Pauli* [5] dolgozata a *semleges terek kvantumelektrodinamikájáról*, mely mintegy 6 héttel *Jordan és Wigner* munkája előtt készült el. Itt jut először következetesen kifejezésre a Lorentz-invariancia követelménye a kvantálásnál is. A térerősségek felcserélési összefüggése a következő alakot ölti:

$$[F_{\mu\nu}(x), F_{\sigma\eta}(y)] = iD_{\mu\nu, \sigma\eta}(x-y), \quad (1,1)$$

ahol

$$D_{\mu\nu, \sigma\eta}(\xi) = (g_{\nu\sigma}\partial_\mu\partial_\eta + g_{\mu\eta}\partial_\nu\partial_\sigma - g_{\mu\sigma}\partial_\nu\partial_\eta - g_{\nu\eta}\partial_\mu\partial_\sigma) \cdot D(\xi) \quad (1,2)$$

és

$$D(\xi) = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3k}{|k|} \sin k\xi^0 e^{i(k\xi)} \quad (1,3)$$

a Jordan—Pauli-féle invariáns függvény;  $\partial_\mu$  a  $\partial/\partial\xi^\mu$  differenciálást jelenti. Az invariáns függvény lényeges tulajdonságai a következők:

$$D(-\xi) = -D(\xi), \quad (1,4)$$

$$\square D(\xi) = g^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu D = 0. \quad (1,5)$$

(1,4) és (1,5), valamint az a követelmény, hogy  $D$  invariáns legyen az  $L_+^\dagger$  valódi Lorentz-csoporttal szemben:

$$D(A\xi) = D(\xi), \quad A \in L_+^\dagger, \quad (1,6)$$

$D$ -t egy állandó tényező erejéig meghatározza. De már magából (1,4)-ből és (1,6)-ból is következik, hogy

$$D(\xi) = 0, \quad \text{ha} \quad \xi^2 < 0, \quad (1,7)$$

azaz, az (1,1) kommutátor térszerű  $x-y$  esetén eltűnik. (Ez azért van így, mivel  $L_+^\dagger$  egy  $\xi^2 = -\alpha^2 < 0$  hiperboloid pontjait egymásba transzformálja s egy invariáns függvénynek ezen a hiperboloidon állandónak kell lennie. Az állandó értéke (1,4) miatt csak nulla lehet.) Érdekes, hogy az utóbbi megállapítást a dolgozat nem hangsúlyozza különösebben, bár *Heisenbergnek* [6] a határozatlansági összefüggésre vonatkozó munkája már megjelent ugyanazon folyóirat egy korábbi kötetében; kézenfekvő lett volna tehát (1,7)-nek és (1,1)-nek a határozatlansági elv alapján való értelmezése.

Az idézett dolgozat szellemében továbbhaladva vessük fel azt a kérdést, hogy mit mondhatunk invarianciamegfontolások alapján a

$$\langle [F_{\mu\nu}(x), F_{\sigma\eta}(y)] \rangle_0 = iD_{\mu\nu, \sigma\eta}(x-y) \quad (1,8)$$

menyiségről. A bal oldali kifejezés egy vákuumérték. Feltesszük (a vákuum létezésén túl), hogy az elmélet invariáns a valódi inhomogén Lorentz-csoporttal szemben.\*

Fennáll továbbá, hogy

$$F_{\mu\nu}(x) + F_{\nu\mu}(x) = 0. \quad (1,9)$$

\* Azzal a kérdéssel, hogy egy olyan elméletben, melyben zérus tömegű részecskék vannak, a vákuum fogalmának van-e értelme, itt nem foglalkozunk.



(1,9)-ből könnyen adódik (1,8) jobb oldalának legáltalánosabb kifejezése:

$$D_{\mu\nu, \sigma\eta}(\xi) = (g_{\nu\sigma}\partial_\mu\partial_\eta + g_{\mu\eta}\partial_\nu\partial_\sigma - g_{\mu\sigma}\partial_\nu\partial_\eta - g_{\nu\eta}\partial_\mu\partial_\sigma)A + \\ + (g_{\nu\sigma}g_{\mu\eta} - g_{\mu\sigma}g_{\nu\eta})B + \\ + (\varepsilon_{\mu\nu\sigma\eta}\partial_\sigma + \varepsilon_{\mu\nu\eta\sigma}\partial_\sigma - \varepsilon_{\sigma\eta\mu\nu}\partial_\nu - \varepsilon_{\sigma\eta\nu\mu}\partial_\mu) \cdot \partial_\sigma C + \\ + \varepsilon_{\mu\nu\sigma\eta}D. \quad (1,10)$$

Itt  $A$ ,  $B$ ,  $C$  és  $D$  ismét  $L_+^\dagger$ -invariáns függvényei  $\xi$ -nek.  $\Delta_{\mu\nu, \sigma\eta}(\xi)$  definíciójából következik a

$$\Delta_{\mu\nu, \sigma\eta}(\xi) = -\Delta_{\sigma\eta, \mu\nu}(-\xi) \quad (1,11)$$

szimmetriatulajdonság; ez (1,10) szerint a következő megszorításokat adja az  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  függvényekre:

$$A(-\xi) = -A(\xi), \quad B(-\xi) = -B(\xi), \quad D(-\xi) = -D(\xi), \quad (1,12)$$

másrészt

$$C(-\xi) = C(\xi). \quad (1,13)$$

$A$ ,  $B$ , és  $D$  tehát a  $\xi^2 < 0$  esetben eltűnik,  $C$  azonban nem szükségképpen. Ennél határozottabb következtetést akkor sem tudunk levonni, ha figyelembe vesszük a

$$\partial_\sigma F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\sigma} + \partial_\nu F_{\sigma\mu} = 0 \quad (1,14)$$

téregyenleteket. Ezek alapján  $D=0$  és  $\square C=0$ . Rendkívül valószínűtlen azonban, hogy bárki is komolyan vette volna 1927-ben az (1,10) előállítást, minthogy a jobb oldal 4. rangú tenzorok és pszeudotenzorok keveréke. A jobb oldal egyes tagjai tehát a

$$TP: \quad \xi^{\nu'} = -\xi^\nu \quad (1,15)$$

tükrözésnél nem azonos módon transzformálódnak. Mindenképpen értelmesnek látszik megkövetelni az

$$\langle [F_{\mu\nu}(-x), F_{\sigma\eta}(-y)] \rangle_0 = -\langle [F_{\mu\nu}(x), F_{\sigma\eta}(y)] \rangle_0 \quad (1,16)$$

vagy a

$$\Delta_{\mu\nu, \sigma\eta}(-\xi) = -\Delta_{\mu\nu, \sigma\eta}(\xi) \quad (1,16')$$

egyenlet fennállását. Ekkor  $C$  és  $D$  szükségképpen eltűnik és

$$\Delta_{\mu\nu, \sigma\eta}(\xi) = 0, \quad \text{ha} \quad \xi^2 < 0. \quad (1,17)$$

Ez a figyelemreméltó összefüggés egy tükrözési invariancia és egy kommutátor vákuumértékének eltűnése között speciális esete a CTP-tételnek. Következéseink azonban annyiban megtevesztőek, hogy a teljes CTP-tételhez még egy lényeges új feltevés (a vákuum stabilitásának feltételezése) szükséges.

Azzal a kérdéssel, hogy lehet-e a Maxwell-teret a kizárási elvnek megfelelően is kvantálni, alkalmasint *Jordan* [7] foglalkozott először egy inkább ismeretterjesztő jellegű cikkben. Az utóbbi tény természetesen megnehezíti a megfelelő megjegyzések pontos megértését.

A fenti előállítással szemben itt felhozott érv minden bizonnyal *Pauli* Handbuch-cikkében [8] fordul elő először. E szerint, mivel a klasszikus határesetben  $F_{\mu\nu}(x)$  mérhető, az (1,1) kommutátornak térszerűen elválasztott pontokra el kell tűnnie;  $F_{\mu\nu}$ -nek az  $x$  pontban való mérése ugyanis csak akkor befolyásolhatja az  $y$  pontbeli mérést, ha  $(x-y)^2 > 0$ . Az idevágó rész, amelynél jobban én magam nemigen tudnám jellemezni a helyzetet, a következőképp hangzik:

„Az a körülmény, hogy a klasszikus határesetben az  $E$  és  $H$  térerősségek, mint a tér és idő függvényei, mérhető mennyiségek, tehát fázisuk is mérhető, szükségképpen arra vezet, hogy a fénykvantumok állapotainak szimmetrikusnak kell lenniök (a fénykvantumoknak Bose—Einstein statisztikát kell követniök). Másképp áll a helyzet az anyag esetében, ahol a  $\psi$ -függvények nem mérhető mennyiségek, és ahol az azonos típusú részecskék szimmetrikus és antiszimmetrikus állapotai a korrespondenciaelv szempontjából egyforma szerepet játszanak.” ... „A  $\psi$ -függvény fázisa sem a Hamilton-operátorban, sem más mérhető fizikai mennyiségben nem szerepel, a  $\psi$ -függvény nem mérhető.”

Heisenberg és Pauli két nagy munkája [1] először adja meg a tér kvantálásának rendszeres elméletét, a kvantumelektrodinamikát is beleépítve ebbe az általános keretbe. A dolgozatok egyik fő célja annak bebizonyítása, hogy maga a kvantálási eljárás (kanonikus kvantálás) Lorentz-invariáns. A négydimenziós megfogalmazás helyébe, amely a Jordannal együtt írt munkában még fő szerepet játszott, jól érthető okokból a háromdimenziós lépett. Ismeretes, hogy a kanonikus formalizmus hangsúlyozása és az időnek ezzel kapcsolatos kitüntetése hátráltatta a relativisztikusan invariáns perturbációszámítás kialakulását, és így bizonyos mértékig késleltette a térelmélet fejlődését.

## 2. Az 1940-ig írt munkák

Ebben a helyzetben megkönnyebbülést hozott a pozitronnak C. D. Andersen által történt felfedezése és a merész Dirac-féle lyukelmélet ily módon való beigazolódása.

Világossá vált, hogy a Dirac-elektronokat a kizárási elv szerint kell kvantálni, ha egyáltalán lehetővé akarjuk tenni egy vákuum definícióját.

A továbbiakban az elméletben használt fogalmak analizisét lényegesen előrevitte Bohr és Rosenfeld [9] munkája. Az itt leírt gondolat kísérletek az  $F_{\mu\nu}(x)$  térerősségeknek pontosan az (1,1)-ből következő határozatlansági összefüggésekkel összeférő méréseit teszik lehetővé, s ebben a dolgozat ellentmondott bizonyos korábbi feltevéseknek [10].

Mindez lényegesen megerősítette a Maxwell-térrel kapcsolatban fentebb használt kauzalitási (lokalitási) érveket, és igen valószínűnek látszott, hogy az elmélet keretein belül a töltéssűrűség is ellentmondásoktól mentesen lokalizálható.\* Ez a feltevés igen jól összeegyeztethető a lyukelmélettel, amelyben a töltéssűrűség értelmes lokális fizikai mennyiség. Nem igaz azonban ez a részecskesűrűsége.

Ez a megállapítás, mellyel a skalár relativisztikus hullámegyenlettel szemben és a négykomponensű egyenlet mellett felhozott eredeti Dirac-féle érvelés eszik, kiindulópontként szerepel Paulinak és Weisskopfnek [11] a skalár relativisztikus hullámegyenlet kvantálásáról írt munkájában. Ez az egyenlet itt 0-spinű töltött részecskéket ír le. A  $\psi(x)$  hullámfüggvény komplex, s fázisa egy mértékcsoport létezése miatt elvileg nem mérhető. A Maxwell-tér esetében alkalmazott lokalitási érv tehát a  $\psi$  térre nem alkalmazható látatlanban. Bizonyára feltételezhetjük azonban egy lokalizálható töltéssűrűség létezését. Ez, mint az összes többi fontos fizikai

\* Pontosán szólva az összes lokális operátort közepelni kell alkalmas súlyfüggvényekkel a tér és idő valamilyen tartományára.



menyiség, bilineáris  $\psi$ -ben és  $\psi^*$ -ban, és szabad tér esetén alakja a következő:

$$\varrho = ie[(\partial_0 \psi^*)\psi - \psi^* \partial_0 \psi] \quad (2,1)$$

Mármost nyilvánvalóan

$$[\varrho(x), \varrho(y)] = 0, \quad \text{ha} \quad (x-y)^2 < 0, \quad (2,2)$$

amennyiben  $\psi(x)$  és  $\psi(x')$  felcserélhető és

$$[\psi^*(x), \psi(y)] = 0, \quad \text{ha} \quad (x-y)^2 < 0. \quad (2,3)$$

Ugyanez lenne azonban a helyzet, ha  $\psi(x)$  és  $\psi(x')$  antikommutálna és

$$[\psi^*(x), \psi(y)]_+ = 0, \quad \text{ha} \quad (x-y)^2 < 0 \quad (2,4)$$

állna fenn, úgyhogy  $\varrho(x)$  lokalizálhatóságából nem következtethetünk biztosan (2,3)-ra. A (2,3) egyenlet a kanonikus kvantálásnak, tehát Bose—Einstein statisztikának felel meg. A (2,4) egyenlet azonban nem felel meg a kizárási elv szerinti kvantálásnak, hanem egyszerűen értelmetlenség. Valóban, ha feltesszük, hogy (2,4) bal oldala c-szám (ami a kizárási elv szerint kvantált szabad elméletben igaz), akkor, tekintettel arra, hogy

$$[\psi^*(x), \psi(y)]_+ = F(x-y) \quad (2,5)$$

eleget tesz a

$$[\partial^\mu \partial_\mu + m^2] F(\xi) = 0 \quad (2,6)$$

hullámegyenletnek és Lorentz-invariáns, (2,4)-ből következik, hogy  $F(x)$  szükségképpen páratlan. Tehát tetszőleges  $x$ -re és  $y$ -ra

$$\psi^*(x)\psi(y) + \psi^*(y)\psi(x) + \psi(y)\psi^*(x) + \psi(x)\psi^*(y) = 0 \quad (2,7)$$

ami nyilvánvalóan csak  $\psi=0$  esetén lehetséges.

Ez az egyik érv, amelyet az idézett dolgozat a kizárási elv szerinti kvantálás ellen felhoz. Egy későbbi értekezés [12] kimutatja, hogy ilyenkor a töltéssűrűség akkor sem lesz lokális, ha benne a terekben nem lokális kifejezéseket is megengedünk.

Ily módon a legfontosabb esetekben, a 0-spinű és 1/2-spinű részecskék és a fotonok esetében kielégítően lehetett magyarázni a spin és a statisztika közötti összefüggést. Mielőtt azonban azt tetszőleges spin esetére általánosítani lehetett volna, meg kellett adni a szabad tér elméletét a Lorentz-csoport tetszőleges véges ábrázolására. Ezt Dirac [13] munkájához kapcsolódva Fierz [14] végezte el. Kiderült, hogy, teljesen általánosan, a kvantálás előtt a kétértékű ábrázolásoknál (feles spin) a teljes energia indefinit, a töltés pedig definit. Hogy stabil vákuumot kapjunk, a kizárási elv szerint kell kvantálnunk. Ekkor szimmetrikus módon kétféle töltésű részecskéket kapunk. Az egyértékű ábrázolásoknál (egész spin) a teljes energia definit és a töltés indefinit. Így a Bose—Einstein-féle kvantálás lehetséges, a kizárási elv szerinti kvantálás azonban nem fér össze egy lokális töltéssűrűséggel. Az érvelés itt teljesen hasonló azokhoz a következtetésekhez, amelyek (2,4)-ből a (2,7) ellentmondásra vezettek.

Természetesen, valós tenzortér esetében az érvelést kissé módosítani kell: itt, az elektromágneses térhez hasonlóan, magának a térnek a megfigyelhetőségét is



feltesszük. Hasonló megjegyzés vonatkozik azokra a kétértékű terekre, amelyek a Majorana-féle realitási feltételnek vannak alávetve. Itt is meg kell követelnünk egy bilineáris mennyiség lokalizálhatóságát.

*Fierz* munkájával kapcsolatban feltétlenül meg kell még említeni azokat a dolgozatokat, amelyek az inhomogén Lorentz-csoport irreducibilis unitér ábrázolásainak *Wigner* által adott analízisén alapulnak [15]. Ezek megmutatják, hogy *Fierz* elmélete az inhomogén Lorentz-csoport minden nullától különböző valós tömegű ábrázolásához szolgáltat legalább egy hullámegyenletet. Zérus tömeg esetében csak olyan ábrázolásokhoz találunk hullámegyenletet, amelyek a nem-zérus tömegű ábrázolásokból határátmenettel adódnak. A zérus tömeghez tartozó egyéb ábrázolásoknak, amelyek a diszkrét spinváltozó helyett egy folytonos változóval jellemezhetők, valószínűleg nincs fizikai szerepük. Ezek kvantálásával nem foglalkozunk.

*Pauli* híres munkája [16], a *The Connection Between Spin and Statistics* c. dolgozat először is általánosítja *Fierz* eredményét nem szükségképpen irreducibilis spinorterekre. *Pauli* ezenkívül új és érdekes módszerekkel közvetlenül bebizonyítja, hogy egy (nem kvantált) szabad-tér elméletben, amely invariáns a valódi Lorentz-csoporttal szemben, egyértékű ábrázolásoknál a töltéssűrűség, kétértékű ábrázolásoknál az energiasűrűség indefinit. Ehhez kapcsolódnak a fentebb említett következtetések, melyekhez egész számú spin esetén mindenestre át kell venni *Fierznek* a pozitív energia létezésére vonatkozó eredményét.

Ami mármost az új matematikai módszereket illeti, ezek egyrészt a spinorok négy osztályba való sorolásán, másrészt azon a felismerésen alapszanak, hogy a szabad terek hullámegyenlete tükrözéssel szemben invariáns, akkor is, ha eredetileg csak a valódi Lorentz-csoporttal szembeni invarianciát tételezzük fel.

A spinorterek osztályozása a  $((-1)^m, (-1)^n)$  előjelpár segítségével történik. Itt  $m$  és  $n$  a spinor pontozott és pontozatlan indexeinek a száma. Ez a karakter egyértékű ábrázolásokra a  $(+, +)$  és  $(-, -)$  értékeket veszi fel. Az első páros, a másodikat páratlan rangú tenzorok esetében. A kétértékű ábrázolásokat a  $(+, -)$  és  $(-, +)$  értékek jellemzik, s fennáll a

$$\psi_{(+, -)}^* = \varphi_{(-, +)} \quad (2,8)$$

szimbolikus egyenlet. Egyértékű ábrázolásoknál a komplex konjugáltra való áttérés nem változtatja meg a karaktert.

Az  $i\partial_\nu = p_\nu$  operátor karaktere  $(-, -)$ . Az egyértékű terekre vonatkozó lineáris hullámegyenlet tehát a következő szimbolikus alakot ölti:

$$\begin{aligned} \Sigma p \psi_{(+, +)} &= \Sigma \psi_{(-, -)}, \\ \Sigma p \psi_{(-, -)} &= \Sigma \psi_{(+, +)}. \end{aligned} \quad (2,9)$$

Ez a

$$\left. \begin{aligned} \psi_{(+, +)} &\rightarrow \psi_{(+, +)}, & \psi_{(-, -)} &\rightarrow -\psi_{(-, -)}, \\ p &\rightarrow -p \end{aligned} \right\} (\theta)$$

transzformációval szemben invariáns. Ebből egyszerű módon adódik, hogy egy  $p$ -ből,  $\psi_{(+, +)}(x)$ -ből és  $\psi_{(-, -)}(x)$ -ből (véges számú szorzással és összeadással) képezett páratlan rangú tenzor  $(\theta)$  alkalmazásakor előjelet vált. Nem létezik tehát definit töltéssűrűség.



Érdekesebb a kétértékű ábrázolások esete. Itt a hullámegyenlet szimbolikusan

$$\begin{aligned}\Sigma p \psi_{(+, -)} &= \Sigma \psi_{(-, +)}, \\ \Sigma p \psi_{(-, +)} &= \Sigma \psi_{(+, -)}.\end{aligned}\quad (2,10)$$

A (2,10) egyenlet megint invariáns egy olyan transzformációval szemben, amely  $p$ -t  $-p$ -be és  $\psi_{(\sigma_1, \sigma_2)}$ -t  $\sigma_1 \psi_{(\sigma_1, \sigma_2)}$ -be viszi át. Ez a transzformáció azonban nem fér össze (2,8)-cal. Ez az alapvetően fontos tény vezeti Paulit a következő transzformációra:

$$\left. \begin{aligned}\psi_{(+, -)} &\rightarrow i\psi_{(+, -)}, & \psi_{(-, +)} &\rightarrow (-i)\psi_{(-, +)}, \\ p &\rightarrow -p.\end{aligned} \right\} (\theta')$$

Ekkor viszont következik, hogy minden  $\psi_{(+, -)}(x)$ -ből,  $\psi_{(-, +)}(x)$ -ből és (tetszőleges rendű) deriváltjaikból felépített páros rangú tenzor  $(\theta')$  alkalmazásakor előjelet vált. Kétértékű terek esetében tehát az energia nem lehet pozitív definit.

A  $\theta$ ,  $\theta'$  transzformáció létezése rendkívül figyelemre méltó. Tulajdonképpen jelentése csak a CTP-tételnél válik világossá.

Paulinak ezzel a vizsgálatával a témakör bizonyos tekintetben lezárult. Szabad részecskék esetében a spin és a statisztika közötti összefüggés kielégítően tisztázódott. Az összefüggésben „a speciális relativitáselmélet egyik legfontosabb alkalmazását” láthatjuk.

Foglaljuk össze még egyszer azokat a feltevéseket, amelyek ennek az összefüggésnek a levezetésénél lényegesek voltak:

1. Invariancia a valódi Lorentz-csoporttal szemben.
2. Egy energetikailag legmélyebb állapot létezése, amely normálható és nem elfajult, és amelyet a vákuummal azonosítunk.
3. Pozitív skalárszorzat a lineáris állapottérben.
4. A fizikai mennyiségek, mint pl. a töltéssűrűség, térszerűen elválasztott pontokban felcserélhetők. Maguk a terek térszerű elválasztás esetén kommutálnak vagy antikommutálnak (lokalitás).

### 3. A spin és a statisztika kérdésével foglalkozó új munkák. A CTP-tétel

A kvantumelektrodinamikának J. Schwinger, R. P. Feynman és F. J. Dyson munkáit követő nagyarányú fejlődése újra felvetette a spin és a statisztika immár klasszikus problémáját.

Mindenekelőtt Feynman [18] új és felfrissülést hozó nézetei váltottak ki vitát. Ezen formalizmus keretében a helytelen statisztika 1-nél nagyobb valószínűséget adott arra, hogy egy gyenge külső elektromágneses tér változatlanul hagyja a vákuumot. Pauli analízise [19] a szokásos formalizmusban olyan modellre vezet, amelyben a 2,1, 2,2 és 2,4 követelmények teljesülnek, 2,3 azonban nem. A nem szükségképpen pozitív, de valós metrika bevezetését az állapottérben más céllal Dirac már korábban kezdeményezte és Pauli [20] behatóan diszkutálta. Az indefinit metrika bevett módon azonban csak a kvantumelektrodinamikában játszik bizonyos korlátozott szerepet [21].

Sokkal figyelemreméltóbb volt az a sajátos mód, ahogyan Schwinger [22] adott spin esetében a helyes statisztikát megalapozta. Ez nála abból a követelményből adódik, hogy a  $P$  tértükrözéssel szemben invariáns elméletek legyenek invariánsak



a  $T$  időtükrözés és a részecske-antirészecske konjugáció egyidejű alkalmazásával szemben.\*

*Schwinger*től függetlenül *Lüders* [24] arra az igen hasonló eredményre jutott, hogy egészen általános feltevések mellett egy  $P$ -invariáns elmélet, amelyben a normális felcserélési összefüggések állnak fenn, automatikusan  $CT$ -invariáns.

Az itt vázolt tétel végleges és általános megfogalmazása azonban ismét *Pauli*től [25] származik (*CTP-tétel*): ha egy térelmélet normális felcserélési összefüggésekkel invariáns a valódi Lorentz-csoporttal szemben, akkor egyben  $CTP$ -invariáns is.

Az új megfogalmazás annyiban nyújt többet, hogy (még a paritásértés felfedezése előtt!) csak a valódi Lorentz-csoporttal szemben tételez fel invarianciát. Ezenkívül *Pauli* a tételt tetszőleges spinre bebizonyítja, míg *Lüders* a legfontosabb, a  $0$ ,  $1/2$  és  $1$  spinértékekre szorítkozik.

Teljesen világos volt, hogy a tétel gyökere abban a körülményben keresendő, hogy a  $TP$ -transzformáció a komplex Lorentz-csoportban folytonosan összeköthető az egységgel. Így *Pauli* munkája a probléma és az eredmények megfogalmazása tekintetében lényegesen túlmutat az alkalmazott bizonyítási módszereken.

Az ezután következő új dolgozatok sorát nincs szándékunkban ismertetni. Természetesen, a fizika csoportelméleti alapjainak az a megrázkódtatása, amely a paritásértés felfedezésével járt, felkeltette az érdeklődést az ilyen kérdések iránt.

A „kommutátor vagy antikommutátor különböző terekre?” kérdéssel kapcsolatban *Lüders* [26] egyik munkáját kell megemlíteni. Eszerint a normális felcserélési összefüggések, melyekben térszerű elválasztás esetén a kétértékű ábrázolásokhoz tartozó terek egymás közt antikommutálnak, az egyértékű ábrázolásokhoz tartozó terekkel kommutálnak, és az egyértékű ábrázolásokhoz tartozó terek egymás közt ugyancsak kommutálnak, mindig összeférnek lokális téregyenletekkel. A kiindulási energiasűrűségtől függően azonban más lehetőségek is léteznek, de ezek a terek megfelelő (természetesen nem unitér) transzformációjával, melyet egy speciális esetben *Klein* [27] meg is adott, visszavezethetők a normális esetre.

Az utóbbi időben próbálkozások történtek arra, hogy új alakba öntsék magát a térelméletet. Legismertebb egyrészt a *Lehmann*, *Symanzik* és *Zimmermann* [28], másrészt a *Wightman* [29], által követett irány. Hasznosság szempontjából (ha ez a szó itt egyáltalán megengedhető) az első fölötté áll a második, általánosabb megfogalmazásnak, de a legalaposabb és legnehezebb matematikai elemzéseket kétségkívül *Wightman* kitartó és merész szellemének köszönhetjük.

Ebben az általános keretben is érdeklődhetünk a  $CTP$ -invariancia iránt. Úgy látszik, hogy a *Wightman*-féle séma alkalmas a probléma kielégítő tárgyalására [30].

Kevésbé kielégítő, de talán érdekesebb a spin és a statisztika problémája ebben a formalizmusban. Mivel nem látszik eleve, hogy a *Wightman*-tereknek közük lenne részecskékhez, csak azt kérdezhetjük, hogy egy tér felcserélhető-e (vagy antikommutál-e) a komplex konjugáltjával vagy nem. Ez ismét a megszokott módon függ a tér transzformációs jellegétől. Az összefüggést ebben a vonatkozásban is a „spin és statisztika összefüggésének” szokták nevezni. A probléma részletes tárgyalása *Burgoyne*-től [31] származik. Mindenesetre, ha *Lehmann*, *Symanzik* és *Zimmermann* [28] nyomán a téroperátorok aszimptotikus viselkedésére feltételt ki-

\* Csak futólag említjük meg itt, hogy az időtükrözés szükségképpen *antiunitér transzformációnak* (*Wigner* [23]), vagy a tényezők sorrendjét megfordító automorfizmusnak, antiautomorfizmusnak (*Schwinger*, [22]) felel meg.



szabva részecskéket vezetünk be, a helytelen *gyenge* felcserélési összefüggésekből közvetlenül következik a megfelelő tér eltűnése.

Lüders [26] fentebb említett vizsgálatait eddig még nem építették be ebbe az általános keretbe.

Végül még egy hiányosságra kell rámutatnunk: a töltött részecskékkel kölcsönhatásban álló elektromágneses tér nem illeszthető bele a Wightman-formalizmusba minden további nélkül. Ilyenkor ugyanis az állapottérben egészen speciális indefinit metrikát kell bevezetni [21]. Ez a tény ugyan a CTP-tétel és a fotonok statisztikája szempontjából nem zavarna (a CTP-tételnél a definit metrika nem lényeges), annál inkább zavaró lenne a töltött részek statisztikája szempontjából, mivel ezek nem mértékinvariáns terekkel vannak leírva.

Legmeggyőzőbb lenne talán egy olyan tárgyalás, amelyben kicsiny, de véges fotontömegből kiindulva a határesetet vizsgálánánk, amikor a fotontömeg zérushoz tart [32].

Az alább következő szisztematikus részben megpróbálok formailag egészen elemi, de egyébként teljes ismertetést adni a Wightman-elmélet azon eredményeiről, amelyek a CTP-invariancia és a spin és a statisztika közötti összefüggés vizsgálatához szükségesek.

Az első fejezet a valós és a komplex Lorentz-csoportra vonatkozó tényeket foglalja össze, oly mértékben, amennyire ezekre a későbbiekben szükség lesz. A második fejezetben röviden felidézzük a  $W$ -függvények fő tulajdonságait. A vákuumértékek elméletének egzakt megalapozása tekintetében az irodalomra kell utalnunk [29]. A harmadik fejezet tartalmazza azt a (szempontunkból alapvető) tételt, hogy a vákuumértékek invariánsak a komplex Lorentz-transzformációkkal szemben. A negyedik fejezet a  $W$ -függvények valós regularitási pontjaival foglalkozik. Végül az ötödik és a hatodik fejezetben az ismertetett módszereket és eredményeket alkalmazzuk a CTP-invariancia és a spin és statisztika problémájára.

## SZISZTEMATIKUS RÉSZ

### 1. A homogén Lorentz-csoport

Az  $L$  valós homogén Lorentz-csoport a valós  $\xi = (\xi^0, \xi^1, \xi^2, \xi^3)$  vektorok azon valós, lineáris  $\Lambda$  transzformációinak összessége, amelyekkel szemben a

$$\xi^2 = (\xi^0)^2 - \sum_{k=1}^3 (\xi^k)^2 \text{ alak invariáns.}$$

Ha  $\Lambda$ -val jelöljük a lineáris transzformáció mátrixát is és  $\Lambda^T$ -vel ennek transzponáltját, a Lorentz-transzformációk a

$$\Lambda^T G \Lambda = G, \quad G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

összefüggéssel jellemezhetők. Ebből következik, hogy egy Lorentz-transzformáció determinánsának értéke  $\pm 1$ .  $L$  ennek megfelelően két részre,  $L_+$ -ra ( $\det \Lambda = +1$ ) és  $L_-$ -ra ( $\det \Lambda = -1$ ) esik szét, ahol  $L_+$  maga ismét csoport. Fontos szerepet játszanak a következő invariáns kúpok:

1. A  $\xi^2 > 0$  egyenlőtlenséggel jellemzett időszerű vektorok kúpja. Ez a  $V_+$  pozitív kúp (  $\xi_0 > 0$  és  $\xi^2 > 0$  ) és a  $V_-$  negatív kúp (  $\xi_0 < 0$  és  $\xi^2 > 0$  ) esik szét.
2. A nullvektorok kúpja (  $\xi^2 = 0$ ,  $\xi \neq 0$  ); ez szintén egy  $N_+$  (  $\xi_0 > 0$  és  $\xi^2 = 0$  ) és egy  $N_-$  (  $\xi_0 < 0$  és  $\xi^2 = 0$  ) kúpba esik szét.
3. A  $\xi = 0$  nullvektor.
4. A kúpokon kívül eső térrész, amely a térszerű vektorokból (  $\xi^2 < 0$  ) áll.

Mivel  $A \in L_+$  a pozitív kúpot vagy önmagába, vagy a negatív kúpba transzformálja,  $L_+$  maga is szétesik az  $L_+^\dagger$  valódi Lorentz-csoportra (  $\Delta V_+ = V_+$  ) és  $L_+^\dagger$ -ra (  $\Delta V_+ = V_-$  ). Hasonlóan esik szét  $L_-$ . Mivel könnyen meg lehet mutatni, hogy  $L_+^\dagger$  összefüggő, az  $L$  csoport nem bontható tovább geometriailag.  $L$  négy komponensét az alábbi módon írhatjuk:

$$\begin{aligned} L &= (L_+^\dagger + PTL_+^\dagger) + (PL_+^\dagger + TL_+^\dagger) \\ L &= L_+ + L_- \end{aligned} \quad (1,1)$$

Itt  $P$  és  $T$  a

$$\begin{aligned} P: \quad \xi^{0'} &= \xi^0, \quad \xi^{k'} = -\xi^k & T: \quad \xi^{0'} &= -\xi^0, \quad \xi^{k'} = \xi^k \\ PT: \quad \xi^{v'} &= -\xi^v \end{aligned} \quad (1,2)$$

speciális Lorentz-transzformációkat jelentik.

Az  $L(C)$  komplex homogén Lorentz-csoport a  $\zeta = (\zeta^0, \zeta^1, \zeta^2, \zeta^3)$  komplex vektorok azon komplex, lineáris  $A$  transzformációinak összessége, melyekkel szemben a  $\zeta^2 = (\zeta^0)^2 - \sum_{k=1}^3 (\zeta^k)^2$  alak invariáns. Itt is fennáll, hogy  $\wedge^T G \wedge = G$ . Így  $L(C)$   $L_+(C)$ -re (  $\det A = +1$  ) és  $L_-(C)$ -re (  $\det A = -1$  ) esik szét.  $L_+(C)$  azonban már összefüggő, ezért a következő felbontásra jutunk:

$$L(C) = L_+(C) + PL_+(C) \quad (1,3)$$

$L_+(C)$  tehát valós transzformációkként  $L_+^\dagger$ -t és  $PTL_+^\dagger$ -t tartalmazza. Speciálisan  $L_+(C)$ -ben az  $E$  egységelem összeköthető folytonosan a  $PT$  elemmel, például az alábbi módon:

$$A(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & i \sin \varphi & 0 & 0 \\ i \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi \quad (1,4)$$

Természetesen, a Lorentz-csoport egységelemének egy megfelelő környezetét sokféle analitikus paraméterezéssel jellemezhetjük. Különösen elemi a következő:  
Legyen

$$R = \begin{pmatrix} 0 & \lambda_4 & \lambda_5 & \lambda_6 \\ \lambda_4 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_2 \\ \lambda_5 & -\lambda_3 & 0 & \lambda_1 \\ \lambda_6 & \lambda_2 & -\lambda_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1,5)$$

ekkor

$$A = (E + R)(E - R)^{-1} \quad (1,6)$$



egy Lorentz-transzformáció. Valós  $\lambda$  értékeknek valós, komplexeknek komplex transzformációk felelnek meg.

Valóban, (1,5)-ből következik, hogy  $R^T G + G R = 0$ , amiből

$$\begin{aligned} A^T G A &= (E - R^T)^{-1} (E + R^T) G (E + R) (E - R)^{-1} = \\ &= (E - R^T)^{-1} (E - R^T) G (E - R) (E - R)^{-1} = G \end{aligned}$$

(1,6) megoldása  $R$ -re:

$$R = (A - E)(A + E)^{-1}. \quad (1,7)$$

Ez a megoldás létezik, ha  $-1$  nem sajátértéke  $A$ -nak, ami mindenesetre fennáll az egységelem egy elegendő kis környezetében.

Azokat az (1,6)-beli Lorentz-transzformációkat, amelyek tiszta képzetes  $R$ -hez tartoznak, magukat is tiszta képzeteseknek nevezzük. Ezek azzal a tulajdonsággal rendelkeznek, hogy  $A^{*T} A = A' A = E$ , és ily módon paraméterezéstől függetlenül vannak definiálva.

Különösen fontos lesz számunkra a Lorentz-csoport következő ábrázolása: Legyen a  $\xi$  valós vektorok esetében  $X = \xi^v \sigma_v$ , s hasonlóképp a  $\zeta$  komplex vektorokra  $Z = \zeta^v \sigma_v$ , ahol

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$\xi^2 = \det X$  és  $\zeta^2 = \det Z$ . Ezenkívül  $X^* = X$ . Legyenek  $A$  és  $B$  kétszer kettes mátrixok, amelyekre  $\det A = \det B = 1$ . Ekkor

$$X' = A X A^* \quad (1,8)$$

egy  $A(A) \in L_+^\uparrow$  Lorentz-transzformációt,

$$Z' = A Z B^T \quad (1,9)$$

pedig egy  $A(A, B) \in L_+(C)$  Lorentz-transzformációt ábrázol. Ezek az ábrázolások kétértékűek, az első esetben  $A(-A) = A(A)$ , a másodikban pedig  $A(-A, -B) = A(A, B)$ . Ismét könnyen be lehet látni, hogy minden  $A \in L_+^\uparrow$  (1,8), és minden  $A \in L_+(C)$  (1,9) szerint ábrázolható.

Mint ismeretes, az (1,8) ábrázolás az alapja a spinorszámításnak [33]. A leg-egyszerűbb spinorok,

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

az  $u' = A u$  és  $v' = A' v$  egyenletek szerint transzformálódnak. Itt  $A'$  az  $A$  mátrix komplex konjugált mátrixa, tehát  $A' = A^{*T}$ . Az  $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_m}$  általános spinor úgy transzformálódik, mint az  $u_{\alpha_1} \dots u_{\alpha_n} v_{\dot{\beta}_1} \dots v_{\dot{\beta}_m}$  szorzat, és az  $L_+^\uparrow$  csoport valamelyik véges ábrázolásához tartozik. Ez az ábrázolás irreducibilis, ha a spinor az  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  és a  $\dot{\beta}_1, \dots, \dot{\beta}_m$  indexekben szimmetrikus, és egyértékű, ha  $m$  és  $n$  párossága ugyanaz. Ily módon az összes véges irreducibilis ábrázolást megkaphatjuk.  $L_+^\uparrow$  minden véges ábrázolása teljesen reducibilis. Az  $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_m}^*$  komplex konjugált spinor úgy

transzformálódik, mint  $b_{\beta_1 \dots \beta_m, \dot{\alpha}_1 \dots \dot{\alpha}_n}$ . Spinorokon kontrakciókat csak az

$$\varepsilon^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \varepsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

invariáns spinorokkal hajthatunk végre.

Mármost nyilvánvaló, hogy  $L_+^\dagger$  összes említett ábrázolása kiterjeszthető  $L_+(C)$  ábrázolásává. A  $A(A, B)$  transzformációnál  $u$  és  $v$   $u' = Au$  illetve  $v' = Bv$  szerint transzformálódik. Az  $\alpha_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \beta_1 \dots \beta_m}$  spinor továbbra is úgy transzformálódik, mint az  $u_{\alpha_1} \dots u_{\alpha_n} v_{\beta_1} \dots v_{\beta_m}$  szorzat. Ennek a kiterjesztésnek kétértékű ábrázolásoknál van egy igen figyelemre méltó következménye, amire *Pauli* nagy nyomattal mutatott rá: a *PT* transzformáció, melynek ábrázolása legyen pl.  $A = -E$ ,  $B = E$ , egy kétértékű komplex konjugált spinorpárt nem komplex konjugált párba transzformál. Valóban,  $\alpha_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \beta_1 \dots \beta_m}$  nyilvánvalóan  $(-1)^n$ -nel szorozódik,  $\alpha_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \beta_1 \dots \beta_m}^*$  viszont  $(-1)^m$ -mel, és a szóban forgó esetben  $n$  és  $m$  különböző párosságú.

Egyértékű ábrázolásoknál ez a sajátság nem lép fel.

*Az ábrázolás Pauli-féle karaktere* [16]. Az  $\alpha_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \beta_1 \dots \beta_m}$  típusú ábrázolás karakterének a  $((-1)^n, (-1)^m)$  előjelpárt nevezzük. Két karakter szorzatát a következőképp értelmezzük:  $(a, b)(a', b') = (aa', bb')$ . Az ábrázolások direkt szorzatának a karakterek szorzata felel meg, és egy ábrázolás redukálásánál mindig csak ugyanolyan karakterű ábrázolások lépnek fel. Az egyértékű ábrázolások karaktere vagy  $(1, 1)$  (párosrangú tenzorok), vagy  $(-1, -1)$  (páratlan rangú tenzorok). A kétértékű ábrázolások a  $(1, -1)$  és a  $(-1, 1)$  karakterű osztályokra esnek szét.

*A komplex Lorentz-transzformáció normálalakja.* Azt mondjuk, hogy az  $L_+(C)$ -beli  $A$  és  $\hat{A}$  komplex Lorentz-transzformációk  $L_+^\dagger$ -ra vonatkoztatva ekvivalensek, ha  $\hat{A} = A_1 A A_2$ , ahol  $A_1, A_2 \in L_+^\dagger$ .

Felvetődhet az a probléma, hogy egy ekvivalenciaosztályon belül megtaláljuk a lehető legegyszerűbb reprezentánst. Erre vonatkozólag a következő tétel ad felvilágosítást.

*Tétel.* Minden  $A \in L_+(C)$  komplex Lorentz-transzformáció ekvivalens vagy az

$$M(\varphi, \chi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & i \sin \varphi & 0 & 0 \\ i \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \operatorname{ch} \chi & -i \operatorname{sh} \chi \\ 0 & 0 & i \operatorname{sh} \chi & \operatorname{ch} \chi \end{pmatrix}, \quad \varphi, \chi \text{ valós} \quad (1,10)$$

vagy az

$$M_1(\tau) = \pm \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\tau^2 & \frac{1}{2}\tau^2 & i\tau & 0 \\ -\frac{1}{2}\tau^2 & 1 + \frac{1}{2}\tau^2 & i\tau & 0 \\ i\tau & -i\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau \neq 0, \text{ valós} \quad (1,11)$$

transzformációval.

*Bizonyítás:* Jelöljük az ekvivalenciát a  $\sim$  jellel és tárgyaljuk először az (1,9) ábrázolást. Legyen tehát  $A = A(A, B)$ , ekkor  $(A, B) \sim (CAD, C'BD') \sim (D^{-1}B'^{-1}AD, E)$ . Az utolsó összefüggés a  $C'BD' = E$  választással adódik. Ezután  $D$  megfelelő meg-



választásával a  $B'^{-1}A$  mátrixot normálalakokra transzformáljuk. Mint ismeretes, két eset lehetséges, vagy

$$(A, B) \sim \left( \begin{pmatrix} \lambda^2 & 0 \\ 0 & \lambda^{-2} \end{pmatrix}, E \right) \sim \left( \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda^{-1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \lambda^{*-1} & 0 \\ 0 & \lambda^* \end{pmatrix} \right)$$

$\lambda^2 = e^{x+i\varphi}$ -vel, vagy

$$(A, B) \sim \left( \pm \begin{pmatrix} 1 & 2i\tau \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, E \right) \sim \left( \pm \begin{pmatrix} 1 & i\tau \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & i\tau \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right)$$

tetszőleges nullától különböző valós  $\tau$ -val.

Ha (1,9) alapján meghatározzuk a megfelelő Lorentz-transzformációkat, a fenti normálalakokra jutunk.

Az (1,10) és (1,11) normálalakok nem mások, mint a valós Lorentz-transzformációk ismert normálalakjának [15] megfelelő tiszta képzetes transzformációk. A fenti levezetés annyiban speciális, hogy az (1,9) ábrázolásra támaszkodik. Hasonló eredményt közvetlenül le lehet azonban vezetni tetszőleges dimenziószámra [36].

## 2. A vákuumértékek [29]

Tekintsünk most egy relativisztikus térelméletet véges számú

$$\psi_{v_k}^{(k)}(x)$$

spinortérrel.  $v_k$ -val röviden az  $\alpha_1 \dots \alpha_{n_k}, \beta_1 \dots \beta_{m_k}$  indexek összességét jelöltük. A szokásos feltevések érvényesek, amelyek közül a következőket emeljük ki:

1. Az állapotok tere *Hilbert-tér*, azaz, pozitív skalárszorzat van benne definiálva. A téroperátorok, megfelelő próbafüggvényekkel átlagolva, ebben a térben hatnak.

2. Az elmélet tartalmazza az inhomogén Lorentz-csoport egy unitér ábrázolását.  $(A, a)$  jelentse az  $x' = Ax + a$  transzformációt, ahol  $A \in L_+^\dagger$ . Az ábrázolást jelöljük  $U(A, a)$ -val. Ekkor

$$U(A, a) \psi_{v_k}^{(k)}(x) U^{-1}(A, a) = \sum_{\mu_k} S_{v_k}^{\mu_k}(A^{-1}) \psi_{\mu_k}^{(k)}(Ax + a) \quad (2,1)$$

ahol  $S(A)$  az  $L_+^\dagger$  csoport valamelyik véges ábrázolása. Létezik tehát a  $P_v$  energia-impulzus vektor.

3. Létezik vákuum, azaz, egy legalacsonyabb energiájú, nem elfajult állapot. Ez az állapot a zérus energiaértékhez tartozik és invariáns.

Az így értelmezett térelméletet teljesen meghatározzák a téroperátorok véges szorzatainak vákuumértékei, azaz, a következő alakú kifejezések:

$$W_v(\xi_1, \dots, \xi_N) = \langle \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \rangle_0. \quad (2,2)$$

Itt  $v$  a  $v_0 v_1 \dots v_N$  indexek összességét jelöli és  $\xi_k = x_k - x_{k-1}$ . (2,2)-ben már kihasználtuk a 2-ből és 3-ból következő translációs invarianciát. 2-ből és 3-ból következik továbbá, hogy  $A \in L_+^\dagger$  esetén

$$W_v(A\xi_1, \dots, A\xi_N) = \sum_{\mu} S_v^{\mu}(A) W_{\mu}(\xi_1, \dots, \xi_N).$$



Mivel  $W_v$  a  $\xi$  változóknak egyértékű függvénye, eltűnik, ha  $S(A)$  kétértékű ábrázoláshoz tartozik.

Szemponunktól azonban 2-nek és 3-nak az a következménye döntő jelentőségű, hogy  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$  Fourier-transzformáltja,  $\tilde{W}_v(p_1, \dots, p_N)$ , zérus, ha  $p_k \in V_+$  nem teljesül mindegyik  $p_k$  vektorra. Ebből következik, hogy  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$  egy  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$  analitikus függvény határértéke. Az utóbbit a Fourier-integrál definiálja, és analitikus, ha  $\text{Im}\xi_k \in V_+$ . Az így definiált tartományt a  $\xi$ -változók terében jelöljük  $\mathfrak{R}_N$ -nel.  $\mathfrak{R}_1$  helyett egyszerűen csak  $\mathfrak{R}$ -t írunk.  $\mathfrak{R}_N$  nem tartalmaz valós pontokat, ezek csak a határán lehetnek. Végül a  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$  függvény definíciójából következik, hogy  $A \in L_+^\uparrow$  esetén

$$W_v(A\xi_1, \dots, A\xi_N) = \sum_{\mu} S_v^{\mu}(A) W_{\mu}(\xi_1, \dots, \xi_N). \quad (2,4)$$

Az itt elmondottakat két megjegyzéssel zárjuk:

a) Az 1. feltevést eddig csak implicit módon alkalmaztuk, akkor ti., amikor feltételeztük, hogy az energiaoperátornak létezik valós energiaspektruma. A feltevést csak később fogjuk ismét alkalmazni, és akkor erre kifejezetten felhívjuk a figyelmet.

b) A felcserélési összefüggésekről vagy az elmélet lokalitásáról eddig semmit nem tettünk fel. Erre is később fogunk kitérni.

### 3. Bargmann, Hall és Wightman tétele [29]

Az alábbiakban a címben szereplő, s a további vizsgálatok szempontjából legfontosabb (és legnehezebb) tétellel foglalkozunk.

*Tétel:* Ha  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$   $\mathfrak{R}_N$ -ben reguláris és egyértékű, továbbá minden  $A \in L_+^\uparrow$  esetén

$$W_v(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_{\mu} S_v^{\mu}(A) W_{\mu}(A^{-1}\xi_1, \dots, A^{-1}\xi_N) \quad (3,1)$$

ahol  $S(A)$  a valódi Lorentz-csoport valamelyik véges (és szükségképpen egyértékű) ábrázolása, akkor  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$  egyértelműen folytatható analitikusan az összes  $A\mathfrak{R}_N$  ( $A \in L_+(C)$ ) tartományok egyesítésével kapott  $\mathfrak{R}'_N$  tartományra. Továbbá, a (3,1) egyenlet minden  $A \in L_+(C)$ -re fennáll, ha  $S(A)$  az eredeti ábrázolásnak az 1. fejezet szerint értelmezett egyértelmű kiterjesztése  $L_+(C)$ -re.

*Bizonyítás:* A. A tétel többek között kimondja, hogy a (3,1) egyenlet  $A \in L_+(C)$ -vel felhasználható  $W_v(\xi_1, \dots, \xi_N)$  definíciójára  $\mathfrak{R}'_N$  olyan pontjaiban, amelyek nem tartoznak  $\mathfrak{R}_N$ -hez (ezek olyan  $(\xi_1, \dots, \xi_N)$  pontok, amelyek egy  $A^{-1}$  komplex Lorentz-transzformációval  $\mathfrak{R}_N$ -beli pontokra képezhetők le), és hogy ez a definíció egyértelmű. Az egyértelműséghez azonban szükséges és elegendő, hogy (3,1) mindig fennálljon, valahányszor  $(\xi_1, \dots, \xi_N) \in \mathfrak{R}_N$  és  $(A^{-1}\xi_1, \dots, A^{-1}\xi_N) \in \mathfrak{R}_N$ , de  $A \in L_+(C)$ , vagyis, hogy (3,1)  $A \in L_+(C)$ -vel már  $\mathfrak{R}_N$ -ben sem vezessen többértelműségre. Ez abból következik, hogy  $L_+(C)$  csoport.

Ha ezt megmutattuk, a további már könnyen következik. A (3,1) által definiált folytatás nyilván analitikus: válasszuk  $A$ -t úgy, hogy  $(A^{-1}\xi_1, \dots, A^{-1}\xi_N) \in \mathfrak{R}_N$  legyen, rögzítsük  $A$ -t, és változtassuk  $(\xi_1, \dots, \xi_N)$ -t a vizsgált pont egy elegendő kis környezetében.



A kijelölt főproblémát bizonyos mértékig átfogalmazhatjuk, és pedig oly módon, hogy (3,1) jobb oldalán  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$ -t rögzítjük, és a kifejezést most  $L_+(C)$ -n adott  $F(A)$  függvényként fogjuk fel. Természetesen, a függvény először csak olyan  $A$  transzformációkra van definiálva, melyekre  $(A^{-1}\zeta_1, \dots, A^{-1}\zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$ -ben fekszik. Ezzel  $L_+(C)$ -ben egy  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$ -től függő tartományt rögzítettünk. Azt kell megmutatnunk, hogy ebben  $F(A)$  állandó. A folytatás úgy történik, hogy  $F(A)$ -t az egész csoporton ezzel a  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$ -től függő állandóval tesszük egyenlővé.

B. Egy részeredmény könnyen kiadódik:

$$F(A) = \sum_{\mu} S_{\nu}^{\mu}(A) W_{\mu}(A^{-1}\zeta_1, \dots, A^{-1}\zeta_N) \quad (3,2)$$

ugyanis a  $A=E$  egységelem elegendő kis környezetében állandó  $L_+(C)$ -n. Itt  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \in R_N$  veendő. Hogy ezt belássuk, vezessük be az  $L_+(C)$  csoporton az első fejezetben említett  $\lambda_1, \dots, \lambda_6$  paramétereket. Tekintsünk egy olyan  $|\lambda_k| < a$  kis környezetet, melyen teljesül, hogy

1.  $A(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$  és  $A^{-1}(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$  analitikus,

2.  $S_{\nu}^{\mu}(\wedge(\lambda_1, \dots, \lambda_6))$  analitikus (ez tulajdonképpen nem jelent újabb korlátozást, mivel  $S(A)$ , mint egyértékű ábrázolás, polinom  $A$ -ban.)

(3) ha  $(A^{-1}\zeta_1, \dots, A^{-1}\zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$ ,  $W_{\mu}(A^{-1}\zeta_1, \dots, A^{-1}\zeta_N)$

mint iterált függvény analitikus  $\lambda_1, \dots, \lambda_6$ -ban. Ekkor

$$F(A(\lambda_1, \dots, \lambda_6)) = F_1(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$$

is analitikus függvény.

Valós  $\lambda_1, \dots, \lambda_6$ -ra  $F_1(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$  állandó, mivel a megfelelő transzformáció valós és  $L_+^{\uparrow}$ -beli,  $F_1$  tehát az egész fent definiált tartományban állandó.

C. Nehézség csak akkor lép fel, ha meg akarjuk mutatni, hogy  $F(A)$  a  $(A^{-1}\zeta_1, \dots, A^{-1}\zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$  megszorítással jellemzett egész  $J$  tartományban állandó. Mint  $B$ -ből tudjuk, ez  $E$  valamilyen környezetében, és általánosabban,  $J$  bármelyik pontjának egy megfelelő környezetében igaz. Ez egyszerűen következik abból, hogy  $S(A)$  ábrázolás és  $L_+(C)$  csoport. Ha  $J$  összefüggő, ebből már következik, hogy  $F(A)$  állandó  $J$ -n. Azt fogjuk tehát megmutatni, hogy minden  $A \in J$  pont összeköthető  $E$ -vel egy teljes egészében  $J$ -ben haladó úton. Ez azt jelenti, hogy (ha most  $A^{-1}$ -t  $A$ -val helyettesítjük) minden  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$ -hez és minden olyan  $A$ -hoz, amelyre  $(A\zeta_1, \dots, A\zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$ , találunk kell olyan  $A(t)$  utat, amelyre  $A(0)=E$ ,  $A(1)=A$  és  $(A(t)\zeta_1, \dots, A(t)\zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$ , ha  $0 \leq t \leq 1$ .

D. Az utóbbi feladatot egyszerűsíthetjük. Legyen ugyanis  $A=A_1MA_2$ , ahol  $\wedge_1, \wedge_2 \in L_+^{\uparrow}$  és  $M$  az (1,10) normálalak. Ekkor a keresett utat a következőképp rakhatjuk össze:

1.  $A(t)=A_2(t)$  ha  $0 \leq t \leq 1/3$ ,  $A_2(0)=E$ ,  $A_2(1/3)=A_2$
2.  $A(t)=M(t)\wedge_2$  ha  $1/3 \leq t \leq 2/3$ ,  $M(1/3)=E$ ,  $M(2/3)=M$
3.  $A(t)=A_1(t)MA_2$  ha  $2/3 \leq t \leq 1$ ,  $A_1(2/3)=E$ ,  $A_1(1)=A_1$  (3,3)

Az első és a harmadik út nyilván semmi nehézséget nem okoz, mivel (1)  $L_+^{\uparrow}$ -ra korlátozható,  $L_+$  összefüggő és  $\mathfrak{R}_N$  invariáns ezzel a csoporttal szemben. A második út létezését viszont a következő segédállítás biztosítja.

*Segédttétel:* Legyen  $\zeta(\varphi, \chi) = M(\varphi, \chi)\zeta$ , ahol

$$M(\varphi, \chi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & i \sin \varphi & 0 & 0 \\ i \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \operatorname{ch} \chi & -i \operatorname{sh} \chi \\ 0 & 0 & i \operatorname{sh} \chi & \operatorname{ch} \chi \end{pmatrix} \quad (3,4)$$

$\varphi$  és  $\chi$  valós,  $|\varphi| < \pi$ . Legyen ezenkívül  $\zeta \in \mathfrak{R}$  és  $\zeta(\chi, \varphi) \in \mathfrak{R}$ . Ekkor minden  $0 \leq t \leq 1$  értékre  $\zeta(t\varphi, t\chi) \in \mathfrak{R}$ .

Mivel a segédttételben megadott út csak  $\varphi$ -től és  $\chi$ -től függ,  $\zeta$ -től nem, ily módon több vektor esetében is közvetlenül megkaphatjuk a keresett 2. utat.

Mielőtt a segédttételt bebizonyítanánk, beszélnünk kell még azokról a  $A \in J$  transzformációkról, amelyek az (1,11) normálalakhoz tartoznak. Ezekkel azért nem kell külön foglalkoznunk, mivel  $J$  nyílt, és egy ilyen transzformáció minden környezete tartalmaz az (1,10) normálalakhoz tartozó transzformációkat.

E. *A segédttétel bizonyítása.* Legyen  $\zeta(\varphi, \chi) = \xi(\varphi, \chi) + i\eta(\varphi, \chi)$ . Ekkor

$$\eta^0(\varphi, \chi) = \eta^0 \cos \varphi + \xi^1 \sin \varphi > 0 \quad (3,5)$$

$$(\eta(\varphi, \chi))^2 = A - B > 0, \quad (3,6)$$

s itt

$$A = (\eta^0 \cos \varphi + \xi^1 \sin \varphi)^2 - (\eta^1 \cos \varphi + \xi^0 \sin \varphi)^2 \quad (3,7)$$

$$B = (\eta^2 \operatorname{ch} \chi - \xi^3 \operatorname{sh} \chi)^2 + (\eta^3 \operatorname{ch} \chi + \xi^2 \operatorname{sh} \chi)^2 \quad (3,8)$$

A (3,5) feltétel és a (3,6) és (3,8)-ból következő  $A > 0$  feltétel egy  $\varphi$ -intervallumot határoz meg  $|\varphi| < \pi$ -ben, amely tartalmazza a  $\varphi = 0$ -t és amelynek hossza kisebb, mint  $\pi$ . Legyen  $\varphi_0$  ennek az intervallumnak a középpontja. Ekkor  $|\varphi_0| < \pi/2$  és

$$A = \alpha^2 \cos^2(\varphi - \varphi_0) - \beta^2 \sin^2(\varphi - \varphi_0), \quad (3,9)$$

ahol  $|\varphi - \varphi_0| < \pi/2$ .

Egész hasonlóan  $B$  a következő alakra transzformálható:

$$B = \gamma^2 \operatorname{ch}^2(\chi - \chi_0) + \delta^2 \operatorname{sh}^2(\chi - \chi_0) \quad (3,10)$$

Itt kivétel az az eset, amikor  $\eta^2 = \varepsilon \xi^3$ ,  $\eta^3 = -\varepsilon \xi^2$ ,  $\varepsilon = \pm 1$ . Ilyenkor

$$B = \gamma^2 e^{\pm 2\chi} \quad (3,11)$$

A normális esetben a feltevések szerint fennáll, hogy

$$F(t) = (\alpha^2 + \beta^2)^{1/2} \cos(t\varphi - \varphi_0) - \{\beta^2 + \gamma^2 + (\gamma^2 + \delta^2) \operatorname{sh}^2(t\chi - \chi_0)\}^{1/2} > 0 \quad (3,12)$$

amikor  $t=0$  és  $t=1$ . Ugyanakkor  $F''(t) < 0$ , ha  $\cos(t\varphi - \varphi_0) > 0$ . Az utóbbi feltétel azonban  $0 \leq t \leq 1$  esetén teljesül, mivel  $|\varphi_0| < \pi/2$  és  $|\varphi - \varphi_0| < \pi/2$ .  $F(t)$  tehát a  $0 \leq t \leq 1$  intervallumban konvex és így itt fennáll, hogy

$$F(t) \geq tF(0) + (1-t)F(1) \geq \operatorname{Min}(F(0), F(1)) > 0 \quad (3,13)$$

Mármint (3,13)-ból (3,6), (3,9) és (3,10) alkalmazásával következik, hogy  $0 \leq t \leq 1$  esetén

$$(\eta(t\varphi, t\chi))^2 > (F(t))^2, \quad (3,14)$$



míg

$$\eta^0(t\varphi, t\chi) > 0 \quad (3,15)$$

fennállását (3,5) automatikusan biztosítja.

A (3,11) speciális esetet nyilván hasonlóan (vagy folytonossági érveléssel) intézhetjük el.

#### 4. $\mathfrak{R}'_N$ valós pontjai [30]

Az utolsó fejezetben tárgyalt tétellel túljutottunk a fő nehézségen. A további vizsgálat abban áll, hogy elemi következtetéseket vonunk le a tételből. Természetesen, a tétel  $W_v(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$  függvényeit a 2. fejezet vákuummértékeivel fogjuk azonosítani. Várható, hogy  $\mathfrak{R}'_N$  valós pontjainak (vagyis azoknak a pontoknak, amelyekben a (2,2) vákuummérték, és nem csak esetleges analitikus folytatása reguláris) különleges fizikai jelentésük lesz. Ez így is van. Jelöljük ezeket a pontokat  $(q_1, \dots, q_N)$ -nel. A következő tétel érvényes rájuk:

**Tétel:** A  $(q_1, \dots, q_N)$  valós pont akkor és csak akkor tartozik  $\mathfrak{R}'_N$ -höz, ha a nem-negatív  $\lambda_k$  számok tetszőleges olyan megválasztása esetén, hogy összegük nem zérus, a  $\lambda, q_1 + \dots + \lambda_N q_N$  vektor térszerű.

**Bizonyítás:** A feltétel nyilvánvalóan szükséges. Ha ugyanis  $(q_1, \dots, q_N) \in \mathfrak{R}'_N$ , akkor létezik olyan  $A \in L_+(C)$ , hogy  $q_k = A\zeta_k$  és  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$ . Ekkor  $(\sum \lambda_k \zeta_k)^2 = \xi^2$  valós.  $\xi = \sum \lambda_k \zeta_k$  azonban  $\mathfrak{R}$ -hez tartozik, mivel, lévén hogy minden  $\lambda_k \geq 0$ , imaginárius része  $V_+$ -ban van. Viszont könnyen meggyőződhetünk róla, hogy az  $\mathfrak{R}$ -beli vektorok esetében a valós négyzetek negatívak.

A feltétel *elegendő*. Ha ugyanis teljesül, a legkisebb konvex  $k$  kúp, amely az összes  $q_l$ -t tartalmazza, amely tehát a  $\xi = \sum \lambda_l q_l$ ,  $\lambda_l \geq 0$  pontokból áll, csupa térszerű vektorokat tartalmaz. A  $V_+$  pozitív kúppal és a  $V_-$  negatív kúppal csak a  $\xi = 0$  csúcsa közös. Ekkor  $V_+$ -hoz van olyan  $\alpha_v \xi^v = 0$  érintősík, amely elválasztja  $k$ -tól. Vethetjük pl. úgy, hogy  $\alpha_v \xi^v \geq 0$ , ha  $\xi \in V_+$ ,  $\alpha_v \xi^v \leq 0$ , ha  $\xi \in k$  és végül  $\alpha_v \xi^v \leq 0$   $\xi \in V_-$  esetén.  $V_-$ -hoz ugyancsak találhatunk egy olyan  $\beta_v \xi^v = 0$  érintősíkot, amely elválasztja  $k$ -tól, úgy, hogy  $\beta_v \xi^v \geq 0$ , ha  $\xi \in V_-$ ,  $\beta_v \xi^v \leq 0$ , ha  $\xi \in k$  és  $\beta_v \xi^v \leq 0$ , ha  $\xi \in V_+$ .  $\alpha$  és  $\beta$  nullvektorok, amelyek  $(\alpha\beta) = -2$  szerint normálhatók. Ekkor létezik egy olyan  $A \in L_+^\dagger$  transzformáció, amely  $\alpha$ -t  $(1, 1, 0, 0)$ -ra,  $\beta$ -t pedig  $(-1, 1, 0, 0)$ -ra képezi le. Mármint  $\xi \in k$  esetén egyrészt  $\alpha_v \xi^v \leq 0$ , másrészt  $\beta_v \xi^v \leq 0$ , tehát  $\xi^1 \geq \xi^0$  és  $\xi^1 \leq -\xi^0$ . Speciálisan, ebben a koordináta-rendszerben  $q_l^1 > |q_l^0|$  ( $l = 1, 2, \dots, N$ ).

Ezután könnyen meg lehet mutatni, hogy  $q_l$  a  $q_l = \wedge^{-1} \zeta_l$  alakba írható, ahol  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \in \mathfrak{R}_N$  és  $A \in L_+(C)$ . Legyen mondjuk

$$\zeta_l^0 = i q_l^1, \quad \zeta_l^1 = i q_l^0, \quad \zeta_l^2 = q_l^2, \quad \zeta_l^3 = q_l^3$$

vagy  $\zeta_l = A q_l$ , ahol

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in L_+(C).$$

Ezzel a tételt bebizonyítottuk.

Sajnos, egyelőre nem ismeretes, hogy az előző fejezetben leírt regularitási tartományt lehet-e bővíteni *kiegészítő feltevések nélkül*. Bizonyos azonban, hogy egy

ilyen kiterjesztés a valós regularitási pontokat nem érinti. Ez azért van így, mert könnyen megadhatók olyan függvények, amelyek  $\mathfrak{R}'_N$ -ben regulárisak, de egy tetszőleges előre megadott  $\mathfrak{R}'_N$ -n kívüli valós pontban szingulárisak. Legyen például  $(\xi_1, \dots, \xi_N)$  egy  $\mathfrak{R}'_N$ -n kívüli valós pont. Ekkor tételünk szerint vannak olyan  $\lambda_k \in \mathbb{R}$ ,  $\sum \lambda_k = 1$  számok, hogy vagy  $(\sum \lambda_k \xi_k)^2 = 0$ , vagy  $(\sum \lambda_k \xi_k)^2 - 1 = 0$ . Egyik függvény sem tűnik el  $\mathfrak{R}'_N$ -ben, valamelyik azonban biztosan zérus az előre megadott pontban. Ennek reciproka lesz a keresett függvény.

### 5. Erős és gyenge lokalitás, CPT-invariancia [30]

Lokalitáson azt a követelményt értjük, hogy az olyan fizikai mennyiségek, amelyek a téroperátorokból lokális műveletekkel épülnek fel, térszerűen elválasztott pontokban legyenek felcserélhetők egymással. Ettől kissé eltérő követelmény, amelyből értelmes elméletekben az előbbi következik, az, hogy két tetszőleges téroperátor térszerű távolsággal elválasztott pontokban vagy kommutáljon, vagy antikommütáljon. Ez az *erős lokalitás* a  $W$ -függvények regularitási tartományát megnöveli. A probléma vizsgálatához célszerű új jelölésmódot bevezetni. Legyen

$$\mathfrak{W}_v(x_0, x_1, \dots, x_N) = \langle \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \rangle_0 \quad (5,1)$$

és komplex  $(z_0, z_1, \dots, z_N)$  vektorokra

$$\mathfrak{W}_v(z_0, z_1, \dots, z_N) = W_v(z_1 - z_0, z_2 - z_1, \dots, z_N - z_{N-1}) \quad (5,2)$$

$\mathfrak{W}_v$  reguláris, ha  $(z_1 - z_0, z_2 - z_1, \dots, z_N - z_{N-1})$   $\mathfrak{R}'_N$ -be esik. A  $(z_0, z_1, \dots, z_N)$  vektorokra így definiált tartományt jelöljük  $\mathfrak{S}'_N$ -vel, az  $\mathfrak{S}'_N$ -beli valós pontokat  $(r_0, r_1, \dots, r_N)$ -nel. Az előző fejezetbeli tételből következik, hogy  $i \neq k$  esetén  $(r_i - r_k)^2 < 0$ . Ez az egyenlőtlenség-rendszer persze általában nem áll fenn. A lokalitásból következik, hogy

$$\langle \psi_{v_0}^{(0)}(r_0) \psi_{v_1}^{(1)}(r_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(r_N) \rangle_0 = \sigma \langle \psi_{v_{k_0}}^{(k_0)}(r_{k_0}) \psi_{v_{k_1}}^{(k_1)}(r_{k_1}) \dots \psi_{v_{k_N}}^{(k_N)}(r_{k_N}) \rangle_0 \quad (5,3)$$

ahol  $\sigma$  az antikommütáló terek permutációjának szignaturája.  $\mathfrak{W}$ -függvényekkel kifejezve (5,3) az alábbi alakot ölti:

$$\mathfrak{W}(r_0, r_1, \dots, r_N) = \sigma \mathfrak{W}_v(r_{k_0}, r_{k_1}, \dots, r_{k_N}). \quad (5,4)$$

$\mathfrak{W}_v$  a permutált téroperátorokhoz tartozó függvény. (5,4) nyilván analitikusan folytatható. Így a függvények végülis legalább abban a tartományban regulárisak lesznek, amely a  $z_0, z_1, \dots, z_N$  permutációval szemben invariáns és az  $\mathfrak{S}'_N$ -t tartalmazó tartományok közül a legkisebb. Azzal a kérdéssel, hogy ebben kimerül-e az erős lokalitás, itt nem foglalkozunk [37].

A  $z_k$  koordináták  $(N+1)!$  permutációja között egy és csak egy olyan nem-triviális permutáció van, amely nem teszi lehetővé az  $\mathfrak{S}'_N$  regularitási tartomány bővítését. Ez a következő:

$$\langle \psi_{v_0}^{(0)}(r_0) \psi_{v_1}^{(1)}(r_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(r_N) \rangle_0 = \sigma \langle \psi_{v_N}^{(N)}(r_N) \dots \psi_{v_1}^{(1)}(r_1) \psi_{v_0}^{(0)}(r_0) \rangle_0 \quad (5,5)$$

vagy (magától értetődő jelöléssel)

$$\mathfrak{W}_v^{\rightarrow}(z_0, z_1, \dots, z_N) = \sigma \mathfrak{W}_v^{\leftarrow}(z_N, \dots, z_1, z_0). \quad (5,5')$$



Ugyanis, ha  $(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \in \mathcal{R}'_N$ ,  $\zeta_k = z_k - z_{k-1}$ , akkor  $(-\zeta_N, -\zeta_{N-1}, \dots, -\zeta_1)$  is  $\in \mathcal{R}'_N$ , mert ez a pont  $PT$ -vel a  $(\zeta_N, \zeta_{N-1}, \dots, \zeta_1)$  pontba megy át és  $\mathcal{R}'_N$  definíciója szimmetrikus a  $\zeta_k$  vektorokban. Ha egy elméletben csak az (5,5) felcserélési összefüggések állnak fenn (ezek kifejezetten  $\mathcal{S}'_N$  valós pontjaira vonatkoznak), akkor az elméletet *gyengén lokálisnak* nevezzük.

Figyelemre méltó, hogy (5,5)-ből összefüggés adódik tetszőleges  $x_0, x_1, \dots, x_N$  pontban vett vákuumértékek között. Először is (3,1)-ből és definícióinkból  $\wedge = PT$ -vel következik, hogy  $\mathcal{S}'_N$  valós pontjaira

$$\langle \psi_{v_0}^{(0)}(r_0) \psi_{v_1}^{(1)}(r_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(r_N) \rangle_0 = (-1)^n \langle \psi_{v_0}^{(0)}(-r_0) \psi_{v_1}^{(1)}(-r_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(-r_N) \rangle_0$$

és (5,5) felhasználásával

$$= (-1)^n \sigma \langle \psi_{v_N}^{(N)}(-r_N) \dots \psi_{v_1}^{(1)}(-r_1) \psi_{v_0}^{(0)}(-r_0) \rangle_0$$

vagyis végül

$$\begin{aligned} \langle \psi_{v_0}^{(0)}(r_0) \psi_{v_1}^{(1)}(r_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(r_N) \rangle_0 &= \\ &= (-1)^n \sigma \langle \psi_{v_0}^{(0)*}(-r_0) \psi_{v_1}^{(1)*}(-r_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)*}(-r_N) \rangle_0^* \end{aligned} \quad (5,6)$$

$n$  itt a  $(v_0, v_1, \dots, v_N)$ -ben fellépő pontozatlan indexek száma. (5,6) analitikusan folytatható. Legyen

$$\langle \psi_{v_0}^{(0)*}(x_0) \psi_{v_1}^{(1)*}(x_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)*}(x_N) \rangle = \tilde{W}_v(\xi_1, \dots, \xi_N) \quad (5,7)$$

amivel (5,6)  $\zeta_k = \varrho_k$ -ra a következő alakba írható:

$$W_v(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = (-1)^n \sigma \tilde{W}_v^*(-\zeta_1^*, \dots, -\zeta_N^*). \quad (5,8)$$

Ezzel az analitikus folytatás módja evidens. A  $\zeta_k \rightarrow -\zeta_k^*$  leképezésnél az a lényeges, hogy  $\mathcal{R}_N$ -t önmagába viszi át. Így (5,8)-ban mindkét oldalon áttérhetünk  $\mathcal{R}$  valós határára és (5,7) és (5,1) alkalmazásával kapjuk a keresett összefüggést:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \rangle_0 &= \\ &= (-1)^n \sigma \langle \psi_{v_N}^{(N)}(-x_N) \dots \psi_{v_1}^{(1)}(-x_1) \psi_{v_0}^{(0)}(-x_0) \rangle_0 \end{aligned} \quad (5,9)$$

Az (5,9) összefüggés levezetéséhez a következőket kell megjegyeznünk:

1. Elegendő (5,5)-öt egy tetszőleges  $(r_0, r_1, \dots, r_N)$  pont valamely valós környezetében feltételezni, ekkor már analitikus folytatással tetszőleges  $(r_0, r_1, \dots, r_N)$ -re következik.

2. (5,9)-ből le lehet vezetni (5,5)-öt. Ehhez írjuk be (5,9)-ben  $(x_0, x_1, \dots, x_N)$  helyébe  $(r_0, r_1, \dots, r_N)$ -t és megfelelő változtatással alkalmazzuk az (5,5') utáni első egyenletet.

Az (5,5) és (5,9) egyenlet tehát ekvivalens egymással.

3. Ha sikerül olyan  $\theta\psi = \psi'$  transzformációt találni, hogy (5,9) jobb oldala  $\langle \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \dots \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \rangle_0$  alakba írható, akkor  $\theta$  az elmélet egy anti-automorfizmusa\* (a tényezők sorrendjét megfordító automorfizmus).

Legfontosabb szerepe a következő  $\theta$ -transzformációnak van, melyhez először Pauli jutott el általánosan:

$$\begin{aligned}\psi'_v(x) &= \theta\psi_v(x) = (-1)^n \psi_v(-x) && \text{egyértékű ábrázolásra} \\ \psi'_v(x) &= \theta\psi_v(x) = i(-1)^n \psi_v(-x) && \text{kétértékű ábrázolásra.}\end{aligned}\quad (5,10)$$

Ennek a  $\theta$ -nak lényeges tulajdonsága, hogy  $\theta\psi^* = (\theta\psi)^*$ , tehát hogy az egyes realitási tulajdonságok a transzformáció után is megmaradnak.\*\* Természetesen, az a követelmény, hogy  $\theta$  az elmélet anti-automorfizmusa legyen, ekvivalens az (5,5)-beli  $\sigma$  meghatározott értékének kiválasztásával. A

$$\langle \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \rangle_0 = \langle \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \dots \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \rangle_0 \quad (5,11)$$

egyenletekből (5,10) és (5,9) figyelembevételével következik, hogy  $\sigma = -1$ , amikor a kétértékű terek száma (5,5)-ben egy páratlan szám kétszerese, és  $\sigma = +1$ , ha a kétértékű terek száma (5,5)-ben 4-gyel osztható. Más esetek nem lépnek fel, mert a páratlan számú kétértékű teret tartalmazó vákuumértékek eltűnnek.  $\sigma$ -nak ez az értéke megegyezik a kétértékű terek (5,5)-beli permutációjának szignaturájával. Fennáll tehát a

*CTP-tétel:* Az (5,5) felcserélési összefüggések, ahol  $\sigma$  a kétértékű ábrázolásokhoz tartozó terek permutációjának szignaturája, ekvivalensek az (5,11) egyenletekkel, melyekben a vesszős tereket (5,10) definiálja.

4. Maradjunk a  $\sigma$  ilyen megválasztásánál és beszéljük meg röviden a gyenge lokalitást. Ismeretes, hogy a térelmélet legfőbb matematikai természetű problémája annak eldöntésében áll, hogy a kvantumelmélet általános posztulátumai az erős lokalitással együtt megengednek-e egyáltalán nem-triviális megoldást. A „nem-triviális” itt azt jelenti, hogy például a szórásmátrix különbözik az egységmátrixtól. Felesleges hangsúlyoznom, hogy milyen nyomasztóan keveset tudunk erről a kérdésről.

Gyenge lokalitás esetében *ez a probléma nem merül fel*. A gyenge lokalitás a fentebb levezetett tétel szerint teljesen ekvivalens a  $\theta$ -szimmetriával. Erről viszont könnyen meg lehet mutatni, hogy összefér a kvantumelmélet többi axiómájával. Így minden CTP-invariáns szórásmátrix extrapolálható olyan terekkel, amelyek (5,11)-nek eleget tesznek, tehát gyengén lokálisak [28].

\* Más szóval: az elmélet invariáns a  $\theta\psi = \psi'^+ = \psi^\circ$  antiunitér transzformációval szemben, mert ezzel (5,9) jobboldala:

$$\langle \psi_{v_0}^{(0)}(x_0) \psi_{v_1}^{(1)}(x_1) \dots \psi_{v_N}^{(N)}(x_N) \rangle.$$

\*\* A látszólag legtermészetesebb választás, mely szerint  $\psi'_v(x) = \tilde{\theta}\psi_v(x) = (-1)^n \psi_v(-x)$  minden térre és (5,5)-ben  $\sigma=1$ , ellentmond ennek a követelménynek, amint az 1. fejezetben láttuk. Ezenkívül a következő fejezetben látni fogjuk, hogy  $\sigma$  értéke (5,5)-ben nem tetszőleges, hanem olyan megszorításoknak van alávetve, amelyek lényegesen összefüggenek az állapotter metrikájának pozitív definit voltával. Ezek a megszorítások normális elméletekben kizárják a fenti  $\tilde{\theta}$ -t



Az erős lokalitás ezzel szemben nem a szórásmatrix szimmetriatulajdonságaiban nyilvánul meg, hanem a mátrixelemek analitikus tulajdonságaiban, amelyeket bizonyos általánosított értelemben diszperziós összefüggéseknek nevezhetünk [28, 24].

### 6. A spin és a statisztika közötti összefüggés [31]

Míg  $\sigma$  (5,5)-beli értéke eddig határozatlan maradt, a spin és statisztika tétele legszűkebb értelmezésében felvilágosítást nyújt arra vonatkozóan, hogy mi  $\sigma$  értéke egy adott térből és annak komplex konjugáltjából álló szorzat vákuumértéke esetén. Ebből azután következik, hogy melyek azok a  $\psi_v(x)$  terek, amelyek biztosan nem cserélhetők fel  $\psi_\mu^*(y)$ -gal térszerű  $x-y$ -ra.

Ebben a fejezetben használjuk ki először lényegesen a skalárszorzat pozitív voltát. Az 5. fejezetben ugyan használtuk már egy  $\psi$  tér komplex konjugáltját ( $\psi^*$ ), de ott tulajdonképpen csak a skalárszorzat *hermitikus* voltát használtuk fel.

Fennáll a következő

*Tétel:* Jelölje  $v$  az  $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m$  indexek összességét. A

$$\langle \psi_v^*(x) \psi_\mu(y) \rangle_0 = (-1)^{n+m+1} \langle \psi_\mu(y) \psi_v^*(x) \rangle_0, \quad \text{ha} \quad (x-y)^2 < 0 \quad (6,1)$$

gyenge felcserélési összefüggésekből következik, hogy

$$\psi_v(x) \Omega = \psi_\mu^*(x) \Omega = 0. \quad (6,2)$$

Itt  $\Omega$  a vákuumállapot.

*Megjegyzések:* (1) (6,1) tényleg gyenge felcserélési összefüggés, mivel a 4. fejezet *Tétele* szerint az  $\mathcal{R}$ -beli valós vektorok azonosak a térszerű vektorokkal.

(2) (6,2) a

$$\psi(f) \Omega = \psi^*(f) \Omega = 0 \quad (6,2')$$

egyenlet rövidített alakja, ahol

$$\psi(f) = \int f^\mu(x) \psi_\mu(x) d^4x \quad (6,3)$$

és

$$\psi^*(f) = \int f^{\mu*}(x) \psi_\mu^*(x) d^4x \quad (6,3')$$

megfelelő próbafüggvényekkel átlagolt operátorok.

*Bizonyítás:* (6,1)-ből és (5,9)-ből következik, hogy

$$\langle \psi_v^*(x) \psi_\mu(y) \rangle_0 = - \langle \psi_\mu(-y) \psi_v^*(-x) \rangle_0 \quad (6,4)$$

tszöleges  $x$ -re és  $y$ -ra. Ha mindkét oldalt megszorozzuk  $f^{v*}(x) f^\mu(y)$ -nal és  $x, y$  szerint integrálunk, kapjuk, hogy

$$\| \psi(f) \Omega \|^2 = - \| \psi^*(g) \Omega \|^2, \quad (6,5)$$

ahol  $f^{v*}(x) f^\mu(-x)$  helyett áll. (6,5)-ből az állítás következik.\*

A következőképpen nyilván általánosítható több tényezőt tartalmazó speciális vákuumállapot tudom, hogy egy ilyen általánosítás mire vezet.

Tételünk már tartalmazza a spin és statisztika összefüggésének egy lényeges elemét, mikor kimondja, hogy egy *egyértékű* tér, melyre

$$\langle [\psi_v^*(x), \psi_\mu(y)]_+ \rangle_0 = 0, \quad \text{ha} \quad (x-y)^2 < 0,$$

a vákuumot nullába viszi át, és ugyanez a helyzet egy *kétértékű* térnél, melyre

$$\langle [\psi_v^*(x), \psi_\mu(y)]_- \rangle_0 = 0, \quad \text{ha} \quad (x-y)^2 < 0.$$

Úgy látszik azonban, hogy kiegészítő feltevések nélkül nem vonhatjuk le a kívánt következtetést, azt ti., hogy (6,4)-ből következik a  $\psi_v(x)$  tér *eltűnése*.

Kiegészítő feltevésként vehetjük például az *erős lokalitás* posztulátumát, amely szerint a téroperátorok térszerű elválasztás esetén vagy kommutálnak, vagy anti-kommutálnak. Ekkor már levonható a

*Következtetés:* Az erős lokalitásból és (6,1)-ből következik, hogy  $\psi_v(x) = 0$ .

*Bizonyítás:* Először is következik (6,2), és ebből  $\Xi'_N$  valós pontjára

$$\langle \varphi_0(r_0) \varphi_1(r_1) \dots \psi_\mu(r_k) \dots \varphi_N(r_N) \rangle_0 = \sigma \langle \varphi_0(r_0) \varphi_1(r_1) \dots \varphi_N(r_N) \psi_\mu(r_k) \rangle_0 = 0 \quad (6,6)$$

Itt  $\sigma$  valamilyen előjel,  $\varphi_i$ -ek pedig az elméletben szereplő egyéb terek. Mivel  $(r_0, r_1, \dots, r_N)$  regularitási pontja a (6,6) egyenlet bal oldalának, általánosan következik, hogy

$$\langle \varphi_0(x_0) \varphi_1(x_1) \dots \psi_\mu(x_k) \dots \varphi_N(x_N) \rangle_0 = 0. \quad (6,7)$$

Eltűnik tehát minden olyan vákuumérték, amely a  $\psi_\mu$  teret tényezőként tartalmazza. Ez azt jelenti, hogy  $\psi_\mu$  is eltűnik.

A fenti *következtetést* természetesen más kiegészítő feltevésekkel is megkaphatjuk. Magát (6,2)-t egy posztulátummal lehetetlennek nyilvánítani nem látszik túlságosan meggyőzőnek. Ha ellenben aszimptotafeltételt írunk elő [28] a terek számára, (6,2) már ellentmondást tartalmaz. Ekkor az az előnyünk is megvan, hogy részecskékről beszélhetünk és a következtetésnek ténylegesen van valami köze a statisztikához.

Valószínű azonban, hogy semmiképp nem hagyható figyelmen kívül tartósan az a kérdés, hogy összeegyeztethető-e a pozitív metrika az erős lokalitással. Ha legyengítjük a lokalitást, túlságosan széles keretet kapunk, amelyben ugyan semmilyen ellentmondás nem lép fel, de amelyben nem is lehet semmilyen érdekes következtetésre jutni. Ha megfeledekezünk a pozitív metrikáról, persze még mindig sok nehézséggel állunk szemben [35], de ha a pozitív metrikát elvetjük, fennáll a veszély, hogy az egész, látszólag biztos alap, amelyen állunk, az önkényesség tengerébe süllyed.

Az, hogy a spin és statisztika tétele ilyen figyelemre méltó módon támaszkodik a lokalitás és a pozitív metrika feltételezésére, bizonyára jele annak, hogy — miután végigkísérte egy nagy fizikus munkásságát — ez a tétel továbbra is gyümölcsöző vizsgálatok tárgya marad.

Ez a dolgozat 1958 novemberében készült el és ajándékuul szántam *W.* 60. születésnapjára. *Wolfgang Pauli* váratlan elhunytá után nem tudtam elhatározni magam a cikk átdolgozására.



## IRODOLOM

- [1] *W. Heisenberg és W. Pauli*, Z. Phys., 56, 1, 1929; 59, 168, 1930.
- [2] *P. A. M. Dirac*, Proc. Roy. Soc. A 114, 243, 1927.
- [3] *P. Jordan*, Z. Phys., 44, 473, 1927.
- [4] *P. Jordan, E. Wigner*, Z. Phys., 47, 631, 1928.
- [5] *P. Jordan, W. Pauli*, Z. Phys., 47, 151, 1928.
- [6] *W. Heisenberg*, Z. Phys., 43, 175, 1927.
- [7] *P. Jordan*, Ergebn. exakt. Naturw., 7, 206, 1928.
- [8] *W. Pauli*, Handbuch der Physik, 2. kiadás, 24/1 k. 258. o.
- [9] *N. Bohr és P. Rosenfeld*, Mat.-fys. Medd. 12, No. 8, 1933.
- [10] 1. c. 8/256 o.
- [11] *W. Pauli és V. Weisskopf*, Helv. Phys. Acta 7, 709, 1934.
- [12] *W. Pauli*, Ann. Inst. Poincaré, 6, 137, 1936.
- [13] *P. A. M. Dirac*, Proc. Roy. Soc. A., 155, 447, 1936.
- [14] *M. Fierz*, Helv. phys. Acta, 12, 3, 1939; 23, 412, 1950.
- [15] *E. Wigner*, Ann. Math., Princeton, 40, 149, 1939.
- V. Bargmann és E. Wigner*, Proc. Nat. Acad. Sci., Wash., 34, 211, 1948.
- E. Wigner*, B. Phys., 124, 665, 1947.
- [16] *W. Pauli*, Phys. Rev., 58, 716, 1940.
- [17] *W. Pauli és F. J. Belinfante*, Physica, 7, 177, 1940.
- [18] *R. P. Feynman*, Phys. Rev., 76, 749, 1949.
- [19] *W. Pauli*, Progr. theor. Phys., Osaka, 15, 145, 1943.
- [20] *W. Pauli*, Rev. mod. Phys., 15, 145, 1943.
- [21] *G. Källén*, Encyclopedia of Physics, 8/1 k. 199 o.
- [22] *J. Schwinger*, Phys. Rev., 82, 914, 1951.
- [23] *E. Wigner*, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen 1932, 546.
- [24] *G. Lüders*, Mat.-fys. Medd., 28, No. 5, 1954.
- [25] *W. Pauli*, Niels Bohr and the Development of Physics, 30. o., 1955. London.
- [26] *G. Lüders*, Z. Naturf., 13a, 254, 1958.
- [27] *O. Klein*, J. Phys. Radium, 9, 1938, elsősorban a 7. o.
- [28] *H. Lehmann, R. Symanzik és W. Zimmermann*, Nuovo Cim., 6, 319, 1957 és korábbi munkák.
- [29] *A. Wightman*, Phys. Rev., 101, 860, 1956.
- D. Hall és A. Wightman*, Mat.-fys. Medd., 31, No. 5, 1957.
- [30] *R. Jost*, Helv. Phys. Acta, 30, 409, 1957.
- [31] *N. Burgoyne*, Nuovo Cim., 8, 607, 1958.
- [32] 1. c. 21/196 o.
- [33] *B. L. v. d. Waerden*, Die gruppentheoretische Methode. 1932. Berlin.
- [34] Az idevágó gazdag irodalomból: *H. Lehmann*, Nuovo Cim., 10, 579, 1958.
- [35] *G. Källén és A. Wightman*, Mat. Fys. Skr., 1, No. 6, 1958.
- [36] *R. Jost*, Helv. Phys. Acta, Pauli-kötet.
- [37] *D. Ruelle*, Helv. Phys. Acta, 32, 135, 1959.

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Dálóki János

A kézirat beérkezett: 1964. XII. 17. — Pédányszám: 600 — Terjedelem: 9,17 (A5) ív, 16 ábra

---

Szegedi Nyomda Vállalat 64-5614



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181) útján eszközölhetők.



Ára: 10.— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.591

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Tóth Árpád</i> : Radonmérés szcintillációs módszerrel .....	129
<i>Szalay László, Hevesi János, Kozma László</i> : A lumineszkáló anyagok abszorpciós és fluoreszcencia spektrumai közötti kapcsolatról .....	157
<i>Kovács István</i> : Diszlokációk kontinuum elmélete I. ....	181
<i>Horváth János</i> : Megjegyzések a fluoreszcens molekulák abszorpciós és emissziós szinképének az elméletéhez .....	195
<i>Res Yost</i> : A Pauli-elv és a Lorentz-csoport .....	207



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XIII. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1965

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok közlésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt megjelent munkájáért 100 különlenyomat illet meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# A KRISTÁLYNÖVESZTÉS DIFFÚZIÓS MÓDSZERÉRŐL\*

LENDVAY ÖDÖN

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézete, Budapest

Rosszul oldódó anyagok kristályainak előállítására technikailag a legegyszerűbb módszer a diffúziós növesztés. A diffúziós növesztés során a nukleációs folyamatok tetszés szerinti tartományra korlátozhatók, ill. terjeszthetők ki. A nukleáció megindulásának helye és időpontja közvetlenül számolható a kritikus túltelítettség vagy oldékonysági szorzat ismeretében. Egyszerű módszerekkel elérhető a nukleáció időtartamának, sebességének és a nukleáció tartománya időben való expanziójának vagy kontrakciójának a változtatása. A kísérleti feltételek megválasztásával előállíthatók különböző méreteloszlású kristályos csapadékok, ill. makrokristályok. Az utóbbiak mérete a rendszer paramétereinek helyes megválasztása esetén elérheti az 1,0 cm-t. A keletkező kristályok maximális méreteit a nukleáció és növekedés sebességének viszonya határozza meg. A növesztés során rendszerint a dendritok, ikrek, kristálylapok és tűk mutatják a legnagyobb méreteket. Az ún. térfogati kristályok (ahol a kristálynak mind a három mérete közel azonos) általában kisebbek az előzőeknél. A módszernek fokozott jelentősége van olyan esetekben, ahol a szokásos kristálynövesztő eljárások az előállítandó kristály tulajdonságai miatt nem alkalmazhatók.

A kristályok növekedésének és tulajdonságainak vizsgálata az utóbbi évtizedben rohamos fejlődésnek indult. A szilárd testek tanulmányozása egyre inkább az egykristályok vizsgálatára támaszkodik, ez indokolja meg a kristályképződés tudományos és technikai kutatásának gyors fejlődését. Az egykristályoknak különösen fontos szerepük van a félvezető és lumineszcencia kutatásban, közvetve a magfizikai kutatásokban és még sok, fontos fizikai területen.

Valamennyi, kristályok előállítására alkalmas rendszer metastabil. A metastabilitást az esetek többségében túlhűlés vagy túltelítettség idézi elő. Az említett jelenségeket használja fel csaknem minden kristálynövesztő eljárás. Az egyensúlyi állapottól való eltérés nagysága a kristályosodás megindulásakor döntően befolyásolja a keletkező szilárd fázis krisztallográfiai tulajdonságait, ezért a legtöbb módszer a minimális eltérés biztosításával igyekszik megoldani a nagy és krisztallográfiailag tökéletes kristályok előállítását. Ez sokszor technikailag igen bonyolult és nehezen kivitelezhető eljárásokat eredményez. A hidrotermális, olvadék gőzfázisból, vagy oldatokból történő kristálynövesztés során az egyes paraméterek pontos értéken való tartása vagy programszerű változtatása sokszor igen komoly mérés-technikai és egyéb problémák megoldását teszi szükségessé.

Lényegesen egyszerűbb — bár teljesítőképességét tekintve szerényebb — módszer az ún. diffúziós kristálynövesztési eljárás, melyet először Johnston [1] és Frenelius [2] alkalmazott rosszul oldódó kristályok előállítására. Ez a góckeletkezés és növekedés szabályozását diffúziós anyagtranszport segítségével oldja meg. Az eljárás a legegyszerűbb laboratóriumi eszközök felhasználásával is megvalósítható. Segítségével fizikai mérések szempontjából hozzáférhető méretű (0,1–1,0 cm) kris-

\* Érkezett 1964. okt. 1.



tályok állíthatók elő. A módszer általában vegyületek kristályainak előállítására szolgál, de egyes esetekben elemek kristályainak előállítása is lehetséges.

Frenelius és Johnston dolgozataiban  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ,  $\text{PbCl}_2$ ,  $\text{CaSO}_4$ ,  $\text{BaSO}_4$ ,  $\text{SrSO}_4$ ,  $\text{AgNO}_2$ , stb. kristályok előállításának leírását találhatjuk meg. Berg [3]  $\text{SrSO}_4$ ,  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{PbCrO}_4$  és bázikus rézkarbonátokat (malachit, azurit) állított elő. Hasonló módszerrel sikerült Rathjenak alacsony hőmérsékleten Ca-hidroxilapatitot előállítania [4]. Az elemek közül Anastasiadis [5] és Lefever [6] fém-krisztallitok keletkezését és növekedését figyelte meg, olyan reakciókban, ahol a transzportfolyamatokat ill. a növekedést diffúziós folyamatok szabták meg. Különös érdeklődésre tarthat számot Grimmeis és munkatársainak kísérlete, akik alumíniumfoszfidot állítottak elő alumínium olvadékban  $\text{PH}_3$  felhasználásával [7]. Ide sorolható az a néhány elektrokémiai eljárás is, ahol az elektródfolyamatok során fémkristályok keletkeznek, (legáltalánosabb a Pt-tűre növvő fém dendritek esete) az utóbbiak növekedését ui. minden esetben a határretegbe történő diffúzió szabja meg.

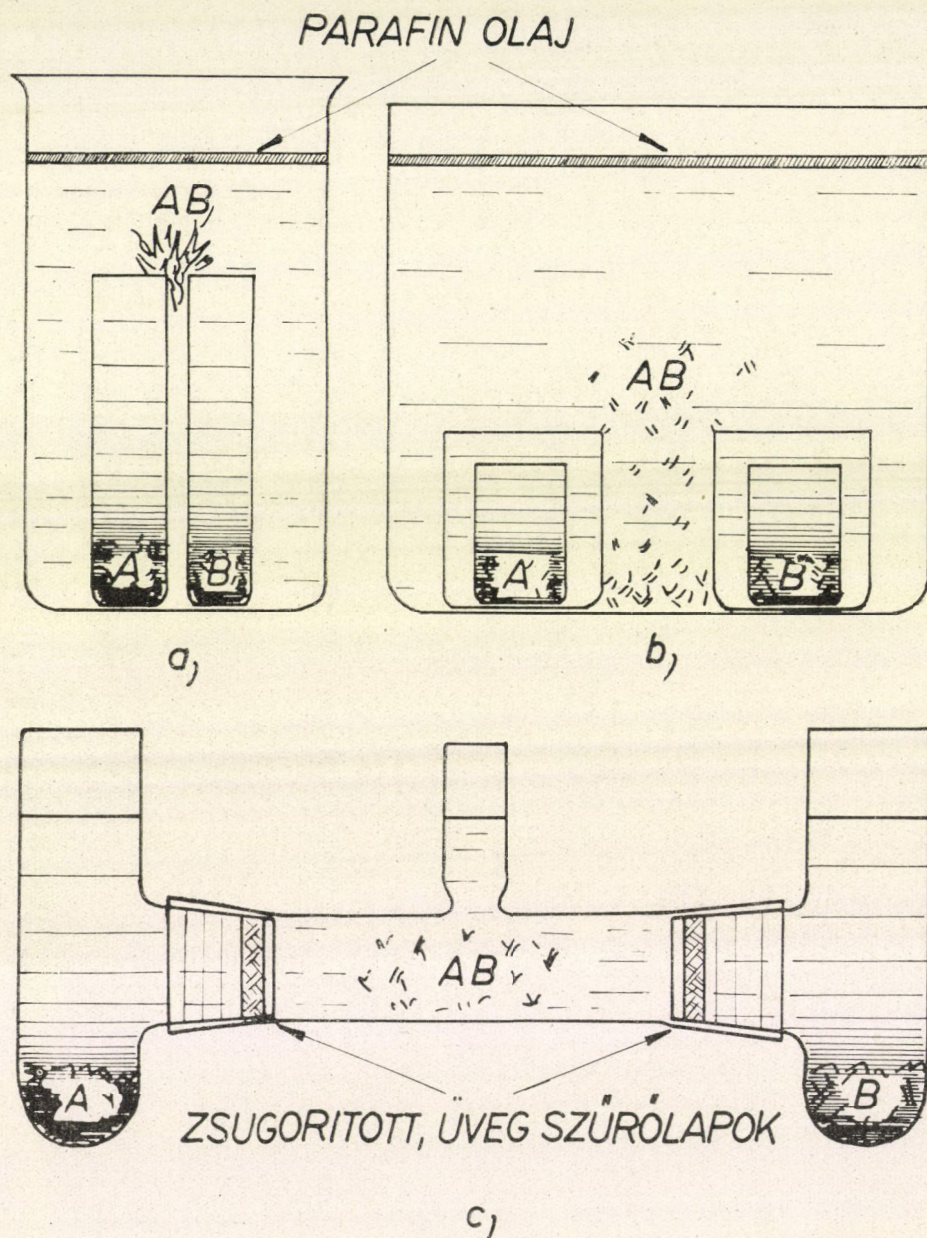
Különös fontossága van a módszernek olyan esetben, amikor az előállítandó kristály oldhatatlan, már alacsony hőmérsékleten, olvadáspontja alatt bomlik és a bomláspontra terjedő hőmérsékleteken kicsi a tenziója. Ilyen vegyületeket főleg a komplexek és a szerves savak sói között találunk [8, 9]. Ilyenkor egyedül a diffúziós módszer alkalmazásával állítható elő megfelelő méretű egykristály. Mindez indokoltá teszi, hogy a módszerrel részletesebben foglalkozunk.

### A kísérleti módszer

A diffúziós kristálynövesztés alapja egy olyan kémiai reakció, melynek során az előállítandó vegyület keletkezik. Ez a vegyület rosszul oldható abban a közegben, ahol a reakció végbemegy. Ez azt eredményezi, hogy a folyamat során állandóan szilárd fázis válik ki. Ha a szilárd fázis leválásának sebessége kicsi, mód nyílik kristályok keletkezésére. A növesztő rendszerben helyezkednek el a reagáló anyagokat szolgáltató anyagforrások, melyek diffúziós úton állandó anyagtranszportot hoznak létre. A folyamat megindulásakor a rendszer egyetlen pontja sem tartalmazza együttesen a reagáló anyagokat, tehát anyagkiválás nincs. Később a diffúziós transzport a rendszer minden pontján előállít egy meghatározott koncentrációviszonyt a reagáló anyagok között. Azokban a tartományokban, ahol a diffúzió következtében előállt koncentráció-eloszlások lehetővé teszik a szilárd fázis kiválását, megindul a kristályosodás. A közeg, melyben a reakció végbemegy elvileg tetszőleges halmazállapotú lehet. Gyakorlati tapasztalataink főként oldatokra vannak, de nincs akadálya gáz vagy szilárd közegű diffúziós növesztéseknek sem. Az anyagforrások szintén tetszőleges halmazállapotúak lehetnek, gyakorlati szempontok azonban a lehetséges kombinációk közül csak néhányat engednek meg. Mivel a legkönnyebben kezelhető és legszemléletesebb folyamatok oldatokban játszódhatnak le, a következőkben ezekkel a rendszerekkel kívánunk foglalkozni. Az oldatoknál nyert tapasztalatok kis módosítással a többi, diffúziós rendszerre is alkalmazhatók.

Oldatokban végbemenő diffúziós kristálynövesztésnél az oldószert úgy kell megválasztani, hogy az egyes, reagáló anyagok diffúziósebessége és oldékonysága megfelelő legyen, a szilárd fázis pedig rosszul oldódjék. Az anyagforrások lehetnek időben állandó és változó erősségűek is, ezek szerepére később még visszatérünk.





1. ábra. Egyszerű, diffúziós kristálynövesztésre alkalmas rendszerek. A reagáló anyagokat  $A$  és  $B$ -vel jelöltük, a keletkező kristály összetétele  $AB$ .  $A$  és  $B$  ion és neutrális, oldott komponens is lehet. A reagáló anyagokat  $t=0$  pillanatban tartalmazó edények az ún. anyagforrások, melyek egy meghatározott felületen keresztül állandó transzportot biztosítanak a növesztő tér felé.

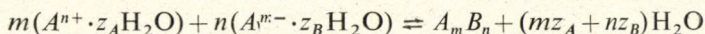


Maga a növesztő rendszer igen egyszerű és sok különböző formában megvalósítható. Az 1. ábrán három, különféle kísérleti elrendezés látható. Az elsőben az anyagforrás két, merőlegesen felállított hengeres edény, melynek aljára a reagáló anyagok kristályait vagy oldatát helyezzük. A diffúzió merőleges irányba, a hengerek tengelye mentén történik. A kristályok rendszerint a hengerek peremén keletkeznek. A második esetben az anyagforrás két vagy több, koncentrikusan elhelyezett edényből áll. A reagáló vegyület kristályai vagy megfelelő töménységű oldata a legbelső edényben helyezkedik el. A külső edényekre a fajsúlykülönbség következtében fellépő keveredések elkerülése miatt van szükség. Mindkét elrendezésnél a közeg párolgásának megakadályozására, vagy erős lecsökkentésére az oldószer tetejére egy vékony, párolgást akadályozó réteget (pl. paraffin olajat) kell felvinni. Ha az egyik reagáló komponens a gázfázisból ered, az említett záróréteget természetesen el kell hagyni, ill. úgy kell megválasztani, hogy a gáz alakú komponenst oldja. A harmadik elrendezésnél az anyagforrások különálló edényei egy oldalnyúlvánnyal vannak ellátva, melynek végeit zsugorított, üveg szűrőlap zárja le. A diffúzió a szűrőlapokon keresztül történik. Ez az elrendezés igen megkönnyíti a keveredés elkerülését összeállításnál és lehetővé teszi, hogy a tiszta, összekötő részben figyelemmel kísérjük a folyamatokat. Ha a kristályképződés vízben játszódik le, sok esetben előnyös tiszta víz helyett valamilyen szerves gélt alkalmazni, mely a reagáló komponensek szempontjából indifferens. Ilyenkor a diffúzióállandók megváltoznak, de ez a változás rendszerint olyan kismértékű, hogy a folyamat szempontjából elhanyagolható.

### A módszer általános elméleti alapjai

Az előzők során idézett munkákban csupán az egyes kristályok előállításának leírását találhatjuk meg. Mivel a kristálynövekedést jelen esetben a diffúziós transzport határozza meg, az optimális paraméterek elméleti meghatározásához első sorban a transzportfolyamatokat, a nukleációt és növekedést kell tanulmányoznunk.

A folyamat első szakaszában a diffúzió egy meghatározott koncentráció eloszlást hoz létre a rendszerben. Mivel a módszer alapja a szabályozott sebességű kémiai lecsapás, a leválási viszonyokat elsősorban az oldékonysági és koncentráció-szorzat szabja meg. Maga a folyamat ionos reakció esetén az



reakcióegyenlettel írható le, ahol  $A_m B_n$  a leváló vegyület,  $n$  és  $m$  az  $A$ , ill.  $B$  ionok töltése,  $z_A$  és  $z_B$  pedig a megfelelő ionok hidratációját jellemző koordinációs szám.<sup>1</sup> Mivel  $A_m B_n$  rosszul oldódó vegyület, a kivált szilárd fázis és az oldat között egyensúly alakul ki, melyet az ún. oldhatósági szorzat jellemez. Ez egy vegyület kristályaira állandó hőmérsékleten és nyomáson egy adott közegben állandó és a

$$K_s = [a_{A^{n+}}]^m [a_{B^{m-}}]^n \quad (1)$$

összefüggéssel fejezhető ki, ahol  $a$  a megfelelő aktivitásokat jelenti. Mivel a keletkező vegyület oldékonysága általában igen alacsony, az aktivitások rendszerint a koncentrációkkal helyettesíthetők.

<sup>1</sup> A hidratburok figyelembevételére nagy ionerősségek esetén tekintettel kell lennünk, mivel a nagy ionkoncentrációknál magának a víznek az aktivitása is megváltozik [10].



Az egyes koncentráció értékeket a rendszer minden pontjában a diffúzió szabja meg. A szilárd fázis kiválásának megindulása előtt az egyes komponensek koncentráció eloszlását a többi komponenstől függetlenül a diffúziós egyenlet szabja meg, azaz

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial t}\right) = \text{div} (D \text{ grad } c_i) \quad (2)$$

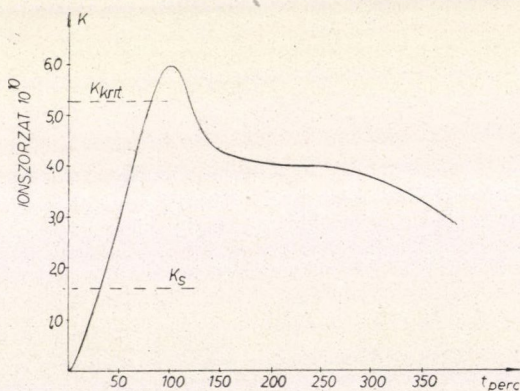
Mivel oldatok esetét tárgyaljuk,  $D$  nem tenzor és kiemelhető. A szilárd fázis kiválása a rendszer azon pontján indul meg, ahol a reagáló anyagok koncentrációinak, pl.  $C_A$ -nak és  $C_B$ -nek a szorzata eléri  $K_s$  értékét, azaz a nukleáció megindulását a diffúzió határozza meg.

Nehézséget jelent, hogy a fenti feltételek mellett  $K_s$  értéke valójában csak makrokristályok síklapjaira állandó. Mikrokrisztályokra az egyensúlyi koncentráció-szorzat (az ún. oldékonysági szorzat) értéke erősen függ a kristály rádiuszától is. Ezt az összefüggést az Ostwald–Freundlich-egyenlet, ill. ennek módosított formája, a Knapp-egyenlet írja le:

$$K_r = K_s \exp \left[ \frac{M}{RT} \left( \frac{2\sigma}{rd} - \frac{q^2 \delta}{4\pi \epsilon r^5} \right) \right] \quad (3)$$

ahol  $K_r$ , ill.  $K_s$  az  $r$  sugarú ill. nagy, síklapokkal rendelkező kristály oldhatósági szorzata,  $M$  — a kiváló anyag molekulatömege,  $d$  — a sűrűsége,  $\sigma$  — a keletkező szilárd fázis felületi feszültsége,  $q$  — az adszorpció által létrehozott felületi kettős-réteg elektromos töltése,  $\epsilon$  — a közeg dielektromos állandója,  $\delta$  — pedig a Helmholtz-réteg egyes rétegei közötti távolság.

(3) egyenletből látható, hogy a nukleációs szakaszban igen kis  $r$  értékeknél az exponenciális kitevőjének második tagja igen nagy értékeket vehet fel, de a növekedés során igen gyorsan konvergál zérushoz. Ez az oka annak, hogy a kritikus túltelítettség általában csupán néhányszorosa, illetve csak nagyságrenddel nagyobb  $K_s$  értékénél. Az előbbi érték az a koncentráció, ill. koncentrációszorzat, ahol a nukleáció valóban megindul. Ez az érték konduktometriás módszerekkel közvetlenül meghatározható. A 2. ábrán Gordon és Klein [11] mérését ábrázoltuk, ahol az ionszorzat értékének változása látható AgCl homogén lecsapásánál. Ennél a módszernél az egyik reagáló komponens állandó sebességgel keletkezik a rendszerben, a másik komponens állandó koncentrációban van jelen. A konduktometriás mérések szerint a nukleáció nem  $K_s$ ,



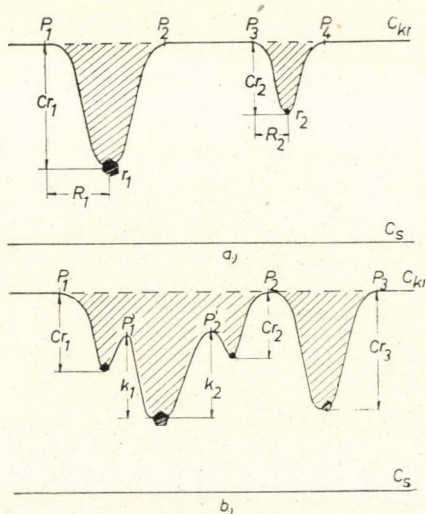
2. ábra.  $\text{Ag}^+$  és  $\text{Cl}^-$  ionokat tartalmazó rendszer ionszorzatának változása AgCl homogén lecsapásánál [11]. Az  $\text{Ag}^+$  ionok állandó koncentrációban vannak jelen, a  $\text{Cl}^-$  ionok egyenletes sebességgel keletkeznek a rendszerben, ezért  $t$  arányos a klorid-koncentrációval.  $K_s$  a makrokristályos AgCl oldhatósági szorzata,  $K_{\text{krit}}$  az az oldhatósági szorzat, ahol a nukleáció valóban megindul



értékénél indul meg, hanem  $K_{krit}$ -nál. Az ionszorzat további emelkedése azt mutatja, hogy a kezdeti szakaszban a nukleáció igen kis sebességgel indul meg és az anyagkiválás csak megfelelő viszonyok kialakulása után válik elég gyorsá ahhoz, hogy visszafordítsa a görbét. Az ilyen típusú mérések adatai igen jól összehangolhatók a Knapp-egyenlettel, de egyúttal azt is jelentik, hogy a kérdés matematikai tárgyalása rendkívül megnehezül.

A fentiek illusztrálására vizsgáljunk meg egy általános modellt, mely nem csak a diffúziós növesztésre, de általában is alkalmazható. Induljunk ki egy homogén, metastabil rendszerből, melyből kristályok keletkeznek. Nyilvánvaló, hogy a rendszer végállapotában a keletkezett kristályok morfológiai tulajdonságait, főleg a méreteloszlásukat két, szimultán folyamat viszonya szabja meg. Ez a két folyamat a nukleáció és a növekedés.

A kristályosodás megindulása előtt a rendszer homogén, és a metastabilitás következtében a gócképződés a rendszer minden pontján egyforma valószínűségű.<sup>2</sup> Magának az említett valószínűségnek a nagysága a metastabilitás mértékétől (túltelítettség, túlhűtéstől stb.) függ. Gócok keletkezése ezt az uniform valószínűségi eloszlást megváltoztatja és a gócok helyén, valamint ezek meghatározott környezetében új gócok keletkezésének valószínűsége gyakorlatilag zérusra csökken. A következő ábra két, lehetséges esetet mutat be. Az első esetben a folyamat kezdeti szakaszán kevés, izolált góc keletkezik. A góc anyagának megfelelő tömeg kiválik a rendszerből, ezért egy koncentrációgödör keletkezik, melynek felső szegélye a kritikus túltelítettségnek, alja pedig az adott góc sugara által meghatározott oldékonyságnak felel meg. Ha  $R_i(t)$ -vel jelöljük azt a sugarat, melyen belül az új gócok keletkezésének valószínűsége a túltelítettség erős lecsökkenése miatt le-



3. ábra. A nukleáció és kristálynövekedés modellje túltelített rendszerekben.

a) Kevés, izolált góc keletkezésekor újabb gócok keletkezésének valószínűsége csak a rendszer igen kis részében, a már kivált  $r_i$  sugarú gócok  $R_i$  sugarú környezetében csökken le. Ez azt eredményezi, hogy a kivált gócok növekedése és újabb gócok keletkezése szimultán játszódik le. A góckeletkezés sebessége állandóan csökken, de csak akkor válik nullává, amikor a koncentráció az egész rendszerben  $c_{krit}$  alá esik. A keletkező rendszer erősen heterodiszperz

b) A folyamat első szakaszában igen nagy a góckeletkezés sebessége. A nagy gócsűrűség következtében a koncentráció mindenütt  $c_{krit}$  alá esik, ezért a góckeletkezés sebessége rohamosan 0-vá válik. A keletkező rendszer csaknem homodiszperz. A bevonalkázott rész mindkét esetben a kivált szilárd fázis tömegének megfelelő, lokális koncentráció csökkenésnek felel meg. A növekedést a góc  $R_i$  sugarú környezetében fellépő koncentrációgradiens biztosítja

<sup>2</sup> Ez természetesen csak arra az esetre vonatkozik, mikor eltekintünk a rendszerben levő heterogenitástól; falhatástól, idegen részecskéktől stb.



esik, a kivált góc tömegét a

$$\frac{4\pi r_i^3(t)}{3} \varrho = \frac{1}{4} R_i^2(t)(C_{kr} - C_{ri}) \quad (4)$$

egyenlettel fejezhetjük ki, ahol  $r_i(t)$  a góc sugara  $t$  pillanatban,  $c_{kr}$  és  $c_{ri}$  a kritikus túltelítettségnek, ill. az  $r_i$  sugarú részecske oldékonyságának megfelelő koncentráció,  $\varrho$  pedig a keletkező szilárd fázis sűrűsége. Az egész folyamat során fennáll a

$$C_{kr} \equiv C_{ri} \equiv C_s \quad (5)$$

egyenlőtlenség, ahol  $c_s$  a  $K_s$ -nek megfelelő egyensúlyi koncentráció. A  $c_{kr}$  és  $c_{ri}$  közötti különbség következtében meginduló diffúziós transzport a góc további növekedését vonja maga után.  $r_i$  növekedése  $c_{ri}$  további csökkenésével jár, azaz a diffúziós transzport sebességének növekedését idézi elő. Ezzel egyidejűleg  $R_i(t)$  értéke is állandó növekedést mutat.  $R_i(t)$  növekedésével az új gócok keletkezésének valószínűsége egyre csökken a rendszerben.

A második esetben a góképződés kezdeti szakaszán is nagy a gócsűrűség. Ez azt jelenti, hogy a növekedő részecskék hatósugarai (az  $R_i$ -k) átfedik egymást és egy olyan bonyolult koncentráció-felület jön létre, mint aminek a 3b ábrán láthatjuk a metszetét. Itt, ellentétben az előző példával, az egymás szomszédságában levő, növekedő magokat nem választják el olyan tartományok, ahol újabb góc keletkezésének valószínűsége véges értékű lenne. Ez azt jelenti, hogy új gócok keletkezésének valószínűsége nem csak egyes tartományokban, de az egész rendszerben erősen lecsökken. Az egyes, koncentráció gödörben levő részecskék növekedését ismét a koncentráció-gradiens által meghatározott diffúziós fluxus biztosítja, de a helyzet bonyolultabb, mint az előző esetben.

Mindez azt jelenti, hogy a diffúziós egyenletet igen bonyolult feltételek mellett kellene megoldanunk. Még egymástól izolált gócok esetén is rendkívüli nehézségekkel találkozunk a kvantitatív tárgyalásnál. Ha a koordináta nullpontját a gömb alakúnak tekintett részecske középpontjába helyezzük és  $r_i$ -vel az  $i$  részecske sugarát,  $R_i$ -vel pedig hatósugarát jelöljük, a megoldásnak ki kell elégítenie a

$$c = c_{kr}$$

$t=0$ -nál és  $0 < t < \infty$ -nál minden olyan tartományra, mely nem tartalmaz  $R_i$ -t

$$c = c_i = c_s \exp \left( \frac{A}{r_i} - \frac{B}{r_i^5} \right) \quad r = r_i\text{-nél}$$

ahol  $A$  és  $B$  a Knapp-egyenlet állandói

$$\frac{dc}{dr} = 0 \quad \text{ha} \quad \begin{cases} r = R_i \\ r = r_i \end{cases}$$

feltételeket. Mivel a differenciálegyenlet megoldása a fenti, mozgó határfeltételek miatt ( $R_i$  és  $r_i$  állandóan változik minden  $t$ -re) igen nagy nehézségekbe ütközik, a továbbiakban a probléma közelítő tárgyalására térünk rá.



### Diffúziós nukleáció és kristálynövekedés

Az előző modellből kvalitatíve látható, hogy a gőckeletkezés kezdeti stádiuma erősen befolyásolja a végállapot méreteloszlását, ez pedig minden egykristálynövesztő eljárásnál döntő jelentőségű. A diffúziós módszer egyik nagy előnye, hogy a rendszer tetszőleges tartományára korlátozhatjuk, ill. kiterjeszthetjük a nukleáció megindulását. Olyan esetekben, mikor az egydimenziós megoldás kielégítő, pontosan is meghatározhatók, ill. tervezhetők ezek a tartományok [12].

Vizsgáljuk meg pl. azt az esetet, amikor az 1c ábrán feltüntetett krisztallizátor anyagforrásai a reagáló vegyületek kristályai, ill. ezek telített oldata. A jelenlevő, szilárd fázis biztosítja az anyagforrás erősségének időbeli állandóságát. Ha a koordináta-rendszer  $O$  pontját az egyik zsugorított, üveg szűrőlap síkjában választjuk meg, akkor (2) egyenlet megoldásának kezdeti feltételei az  $A$  komponens koncentrációeloszlására

$$\begin{aligned} C_A &= 2C_A^0 & x=0 & \quad t>0 & \text{ ahol } 2C_A^0 \text{ a telített oldat} \\ C_A &= 0 & x>0 & \quad t=0 & \text{ koncentrációja} \end{aligned}$$

Az ismert megoldás

$$C_A(x, t) = C_A^0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2(D_A t)^{\frac{1}{2}}} \quad (6)$$

Hasonló eredményre jutunk a  $B$  komponensre  $x' = L - X$  transzformált koordináta felhasználásával, ahol  $L$  a lineáris rendszer hossza. A két koncentrációeloszlás ismeretében a rendszer minden pontjára meghatározhatjuk a koncentrációszorzatot. Ez, az (1) egyenlet felhasználásával a következőképpen fejezhető ki:

$$K(x, t) = (C_A^0)^m (C_B^0)^n \left[ \operatorname{erfc} \frac{x}{2(D_A t)^{\frac{1}{2}}} \right]^m \left[ \operatorname{erfc} \frac{L-x}{2(D_B t)^{\frac{1}{2}}} \right]^n \quad (7)$$

A (7) egyenlet  $x$ -szerinti differenciálásával és a derivált függvény  $\operatorname{erfc}(z)$  tagjainak sorbafejtésével egyszerű összefüggésre jutunk, melyből egyértelműen kiderül, hogy  $K(x, t)$  éles maximumot mutat, melynek koordinátája [12]:

$$x_m = \frac{L}{1 + \frac{mD_B}{nD_A}} \quad (8)$$

Hasonló eredmény nyerhető más, kezdeti feltételeket kielégítő megoldásokra is, ha az  $A_m B_n$  vegyület oldékonysága alacsony. Általában a  $K(x, t)$  függvény időben történő növekedése alakváltozás nélkül megy végbe, ez viszont azt jelenti, hogy a gőcképződés egyetlen ponton indul meg; annál a  $t$  értéknél, ahol  $K(x, t) = K_{\text{krit}}$ . A kezdeti nukleáció helykoordinátája  $D_A$  és  $D_B$  megválasztásával, (8) egyenlet értelmében befolyásolható.

Ha azt akarjuk, hogy adott  $t$  pillanatban az egész rendszerben mindenütt meginduljon a nukleáció, úgy kell terveznünk a rendszert, hogy  $K(x, t)$  csak sokszoros reflexió után érje el  $K_{\text{krit}}$  értékét. Az ilyen koncentrációeloszlások számítása lényeg-



gesen bonyolultabb (6)-nál. A (6)-nak megfelelő, reflexiók megoldás:

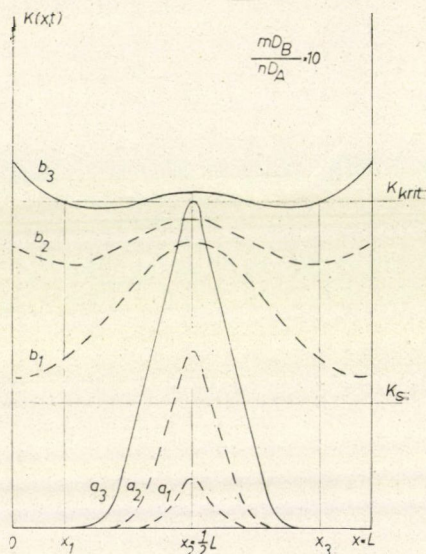
$$C_A(x_1, t) = C_A^0 \left[ \sum_j (-)^j \operatorname{erfc} \frac{(2j+1)L-x}{2(D_A t)^{1/2}} + \sum_j (-)^j \operatorname{erfc} \frac{(2j+1)L+x}{2(D_A t)^{1/2}} \right] \quad (9)$$

Hasonló megoldás írható fel  $c_B(x, t)$ -re is, és az így nyert koncentrációeloszlások alapján  $K(x, t)$  meghatározható többszörös reflexió esetén is.

A 4. ábrán az említett eseteket ábrázoltuk. Az  $a$  görbék a reflexió nélküli, lineáris rendszerekre jellemző  $K(x, t)$  függvény lefutását mutatják különböző időpillanatokban. A  $b$  görbék a reflexiók esetének felelnek meg. Valamennyi görbe a  $mD_B/nD_A=1,0$  esetnek felel meg, mely még  $m \neq n$  esetére is teljesül  $D_A$  és  $D_B$  megfelelő megválasztásával.<sup>3</sup> Az ábrán jól látható, hogy míg a reflexió nélküli esetben  $K(x, t)$  csupán egyetlen  $x_2$  ponton éri el  $K_{\text{krit}}$  értékét, addig a reflexiók esetében az egész  $x_1-x_3$  tartomány mentén megindul a nukleáció. A reflexiók feltételek megválasztásával tehát tetszés szerint beállítható annak a tartománynak a kiterjedése, melyben a magképződés megindul.

A kristálygócok megjelenésével a homogén rendszer heterogénné válik. A heterogenitás megjelenésével az egyszerű, egymástól független koncentrációeloszlások helyett  $R_i(t)$ ;  $r_i(t)$  és a magok eloszlási függvénye, valamint az ezek által erősen módosított diffúziós transzport szabja meg a további folyamatokat.

Tekintsük először a legegyszerűbb esetet. Ez az időben állandó erősségű anyagforrásoknak felel meg, ha a  $c_i^0$  koncentrációk alacsonyak, azaz a reagáló vegyületek oldékonysága is alacsony. Ilyen eseteknél rendszerint izolált gócok keletkeznek a rendszer egy meghatározott, kis tartományában (l. 3a ábra). A koncentráció gödörbe irányuló anyagtranszportot a koncentráció-gradiens



4. ábra.

Kiterjedt és korlátozott kezdeti nukleáció diffúziós rendszerekben,  $mD_B/nD_A=1,0$  esetére. Az  $a$  görbék reflexió nélküli, lineáris rendszerekre jellemzőek. A  $b$  görbék a határoló felületekről történő reflexió esetében állnak elő. Az egyes görbék különböző,  $t$  időknél felelnek meg

$$\frac{dc}{dr} = \frac{C_{\text{krit}} - C_s \exp\left(\frac{A}{r_i} - \frac{B}{r_i^5}\right)}{R_i} \quad (10)$$

szabja meg. Ha a kritikus túltelítettség  $K_s$  sokszorosa, akkor  $A$  és  $B$  anyag ekvimoláris transzportjánál előállhat egy olyan eset, amikor a szilárd fázis olyan gyorsan

<sup>3</sup> Ionos vegyületeknél az indifferens kation, ill. anion megválasztásával a diffúzióállandó széles tartományban változtatható.  $\text{Zn}^{++}$  ionok esetén pl.  $\text{DZn}^{++}$  csaknem egy nagyságrenddel különbözik  $\text{ZnCl}_2$  ill.  $\text{Zn}$ -acetát esetében.



növekszik, hogy a diffúziós transzport csupán a növekvő szilárd fázis utánpótlását, vagy még azt sem biztosítja, azaz

$$\left(\frac{\partial m_i}{\partial t}\right) \cong \frac{\partial}{\partial t} \int C(r, t) dv_i \quad (11)$$

Ez azt jelenti, hogy a szilárd fázis megjelenésének és gyors növekedésének következtében a rendszer a lassú transzport miatt csupán egyetlen, vagy néhány pontban éri el  $K_{\text{krit}}$  értékét. Kevés, de nagyon gyorsan növekvő magok keletkeznek, melyek megátolják a további nukleációt. Ilyen esetekre a Berthoud-egyenlet megfelelő alakja érvényes, azaz

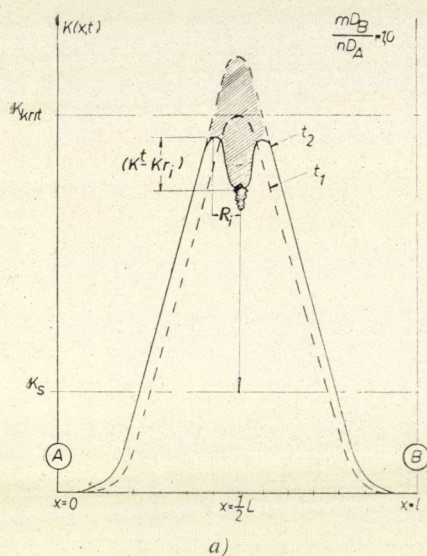
$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{\bar{D}s_i}{R_i + \frac{\bar{D}}{k}} (C_i^t - C_{r_i}) \quad (12)$$

A (12) egyenletben  $\bar{D}$  a reagáló komponensek közepes diffúzióállandója,  $dm_i$  a  $dt$  idő alatt levált anyagmennyiség,  $k$  állandó,  $s_i$  pedig a részecske felülete,  $C_i^t$  a koncentráció-gödör felső pereme. Ha a diffúziós transzport éppen egyensúlyt tart  $dm_i/dt$ -vel, akkor  $C_i^t$  a folyamat kezdeti szakaszán egyenlő marad  $c_{\text{krit}}$ -al. Ha ennél kisebb, a gyors növekedés következtében a  $K(x, t)$  görbe rohamos csökkenésnek indul. Végállapotban egy lineáris növekedési sebesség áll be, ami a  $c_{r_i} = c_s$ ,  $C_i^t = \text{konst.}$  esetnek felel meg.

Egy ilyen folyamat modellje az 5a ábrán látható. A bevonalkázott rész felel meg a kivált anyag mennyiségének. Szaggatott vonallal a nukleáció előtti eloszlást, illetve a  $t_2$  időhöz tartozó eloszlás kiegészítő szakaszát ábrázoltuk ( $t_2 > t_1$ ). Könnyű belátni, hogy a fenti modell csak nagy növekedési sebességek, azaz dendrites növekedés esetén valósulhat meg. Dendritek növekedése diffúziós rendszerekben valóban fellép. A már említett fém dendriteken kívül  $\text{SrCO}_3$  dendritek növekedését sikerült megfigyelnünk. Az 5b ábrán dendrites  $\text{SrCO}_3$  kristályok láthatóak, melyek hossza eléri az 1,0 cm-t. A dendritek oldalán és csúcsán jellegzetes növekedési formák figyelhetők meg. Az előbbi modell érvényességét támasztja alá az is, hogy az említett, dendrites kristályok mérete közel azonos, és mikrokristályos fázis nem lép fel. A dendrites növekedés rendszerint akkor tapasztalható, ha az anyagforrások egyike gázfázisú. Ez a feltétel  $\text{SrCO}_3$  előállításakor a levegő  $\text{CO}_2$ -jével biztosítható. Ilyen esetekben az anyagforrás erősségének időbeli állandósága és megfelelő oldékonyságának beállítása elég könnyű [12]. Hasonló módszerrel lamináris  $\text{CaCO}_3$  dendritek is előállíthatók. Az ilyen rendszerek közelítő tárgyalása az ún. „stagnant film” és az „áthatolási” elmélet alapján is megvalósítható [13].

Az első módszer a gáz és folyadék fázis határán elhelyezkedő, folyadék filmben lezajló gyors, irreverzibilis kémiai folyamatok tárgyalására szolgál abban az esetben, ha az előzőekben említett stacionárius állapot beállt. A gázfázisból származó komponens ( $A$ ) a folyadék-gáz határfelületen állandó;  $c_A^0$  koncentrációban van jelen, melynek nagyságát a Henry-törvény szabja meg. Az  $A$  komponens a folyadék belseje felé diffundál a filmben, ugyanakkor a  $B$  komponens ellenkező irányú diffúziója megy végbe a határfelületen. A megfelelő, közelítő koncentráció-eloszlásokat a 6. ábra tünteti fel. A reakció síkjában mindkét komponens koncentrációja gyakorlatilag zérussá válik. A sík térbeli helyzetét az  $A$  és  $B$  komponensek diffúziósebessége és kiindulási koncentrációja határozza meg. Egyszerű dif-





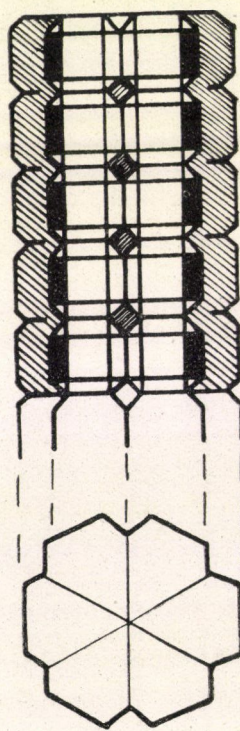
5. ábra. Dendrites növekedés diffúziós kristály-növesztésnél.

a) A dendrites növekedés modellje. A szilárd fázis gyors növekedése miatt  $K(x, t)$  gyorsan csökken  $K_{krit}$  elérése után, azaz a nukleáció csak igen rövid ideig tart, és csak egyes, kitüntetett pontokon (pl.  $x_2 = L/2$ -nél, ha  $m=n$ ,  $D_A = D_B$ ) valósul meg

b) Diffúziós úton előállított, dendrites  $SrCO_3$  kristályok. A rajzon a kristályok jellegzetes felületi szerkezete és keresztmetszete látható. A kristályok legnagyobb mérete 1,0 cm, a növesztési idő 4 nap



b)



b)



fúziós meggondolások alapján (l. [12, 13]) a folyadékfilm, ill.  $d_A$  és  $d_B$  vastagsága kiszámítható mindkét komponensre:

$$d_A = d \frac{D_A C_A^0}{D_A C_A^0 + D_B C_B^0} \quad (13)$$

Hasonló összefüggés írható fel  $d_B$ -re is. A fentiek alapján a következő, közelítő összefüggés írható fel:

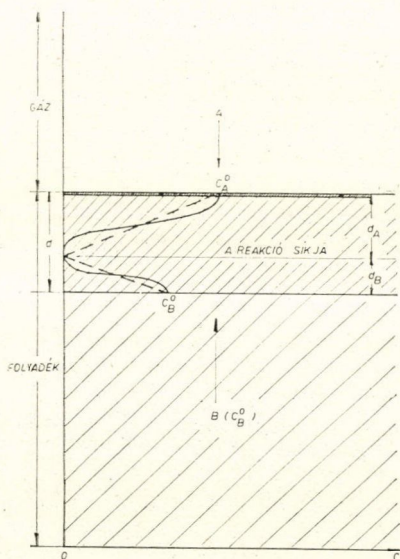
$$\left( \frac{\partial C_A}{\partial t} \right) \approx \frac{D_A C_A^0}{d} \left( 1 + \frac{D_B C_B^0}{D_A C_A^0} \right) \quad (14)$$

A (13) és (14) egyenletek (ill. a megfelelő,  $B$  komponensre vonatkozó egyenletek) segítségével megbecsülhető  $d$ , azaz azon tartomány mérete, ahol a reakció végbe megy. Ha a  $B$  komponens nagy koncentrációban van jelen, vagy maga a folyadék, ill. ha  $D_A$  igen kicsi, a reakció gyakorlatilag csupán a folyadék-gáz határfelületen megy végbe. Ilyen esetekben keletkeznek a dendrites kristályhártyák, vagy dendritek. Ha  $D_B$  vagy  $B$  koncentrációja kicsi, a reakció síkja mélyen behúzódik a folyadékba, de  $K(x, t)$  továbbra is a 4. ábrán látható, éles maximumot mutatja a reakció

síkja mentén. Végül ha a reakciósebesség kicsi vagy reverzibilis reakcióról van szó, a reakció síkja széles sávvá húzódhat szét.

Az utóbbi esetekben dendrites növekedés természetesen nem léphet fel, ilyenkor gyakran tökéletes, de kis méretű kristályok keletkezése figyelhető meg. A 7. ábrán egy ilyen, gáz-folyadék fázisú növesztés eredménye látható. A kristályok  $\text{CaCO}_3$  kristályai igen tökéletes, kifejtett határoló lapokkal. A rendszerben található kristályok méreteloszlása elég széles mérettartományt fed át. Ez annak a következménye, hogy a nukleáció nem egy pontban, vagy síkban, hanem a rendszer teljes keresztmetszetében, egy eléggé kiterjedt zónában indul meg.

Lényegesen eltérő eset áll elő akkor, ha az anyagtranszport sebessége valamivel meghaladja az anyagkiválás sebességét és (11) egyenlőtlenség megfordul. Ilyenkor a nukleációs tér lassú terjedése következik be a növesztő térben. Ez új, növekvő magok megjelenésével jár, ami természetesen megnöveli a keletkező kristályok számát, de csökkenti végső méretüket. A 8a ábrán  $K(x, t)$  változását tüntettük fel egy ilyen rendszerre. Az ábrából látható, hogy az egyes koncentráció-gödrökbe irányuló transzport közel azonos. Ez annak a következménye, hogy bár a magok növekedése időben eltolódva indul meg, az egyes, növekedő krisztallitok felé mutató



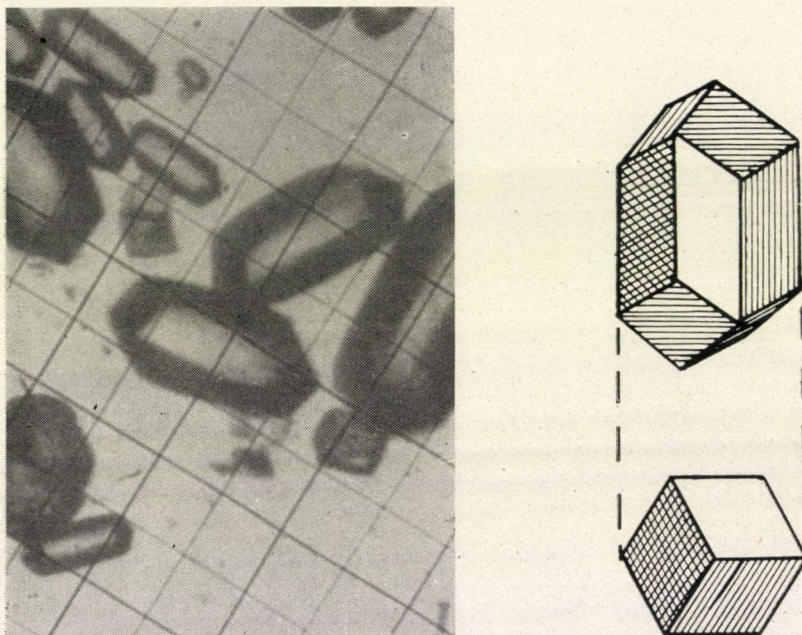
6. ábra. Gázfázisú komponens és folyadék, vagy oldott anyag reakciójának modellje az ún. „stagnant film” elmélet alapján [13]. A sűrűn vonalkázott rész felel meg a filmnek, melyben a reakció következtében előálló koncentrációesés fellép. A teljes vonallal kihúzott görbék a valódi, a szaggatott vonallal jelölt egyenesek a közelítő koncentrációesésnek felelnek meg



koncentrációgradiensek nem nagyon különböznek. További fékezést és kiegyenlítődést jelent, hogy ilyen esetekben a növesztő tér legnagyobb részére megszűnik a diffúzió ekvimoláris jellege, és

$$\left(\frac{\partial m_i}{\partial t}\right) = k \left(\frac{\partial C m_i}{\partial t}\right) \quad (15)$$

ahol  $c_{mi}$  a kisebbségben levő anyag koncentrációja. (Szemléletesen ezt úgy képzelhetjük el, mintha a szembe diffundáló anyagoknak a növekedő gócok ellenállást jelentenének.) Az ekvimolaritás csupán  $x_m$  környezetében marad meg. A legnagyobb

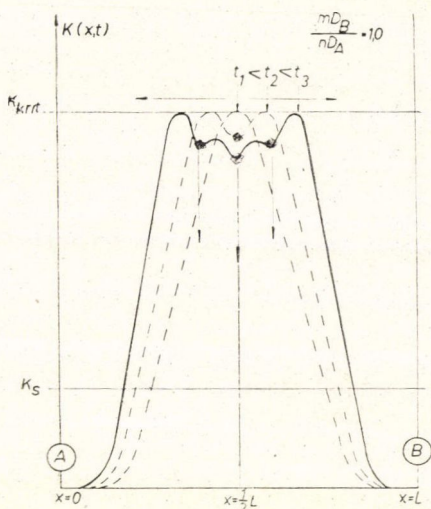


7. ábra. Diffúziós módszerrel növesztett  $\text{CaCO}_3$  kristályok. Az egyik reagáló komponens a levegő  $\text{CO}_2$ -je volt. A kristályok legnagyobb mérete 100 és 1000  $\mu$  között változik. A növesztés időtartama 6 nap

koncentrációkülönbség a szélső gócoknál lép fel, (15) itt érezteti legjobban hatását. Mindez azt eredményezi, hogy a végső méreteloszlási görbe az előző esetnél keskenyebb lesz, és az egészen kis és egészen nagy méretek hiányoznak a méret-spektrumból. A 8b ábrán egy ilyen rendszer,  $\text{SrCO}_3$  kristályok láthatók. A kristályok mérete csak kissé különbözik, morfológiailag is rendkívül hasonlóak. Az egyes kristályokon az előzőekben bemutatott  $\text{SrCO}_3$  dendritekkel analóg módon jellegzetes iker-síkok figyelhetők meg, ami növekedésük mechanizmusának hasonlóságára utal.

Ha a transzportsebesség nagyságrendileg meghaladja a növekedés sebességét, a konkuráló folyamatok közül a nukleáció jut túlsúlyba. Ilyenkor a leváló szilárd



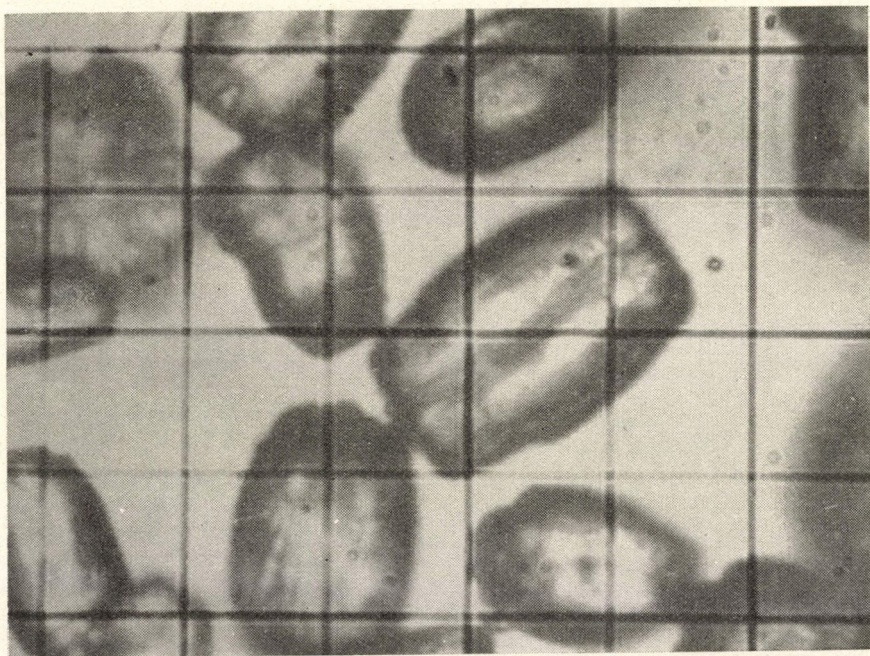


a)

8. ábra. Diffúziós kristálynövekedés terjedő nukleáris tér esetében.

a) A terjedő nukleációs tér modellje. Az anyagkiválás sebessége kisebb a transzportsebességnél, ezért  $K(x, t)$  a rendszer egyre nagyobb tartományában éri el  $K_{krit}$  értékét. Ha a terjedés sebessége lineáris, a növekvő magok felé irányuló transzport értéke a különböző magokra közel azonos

b)  $\text{SrCO}_3$  kristályok, melyek a modellnek megfelelő körülmények között keletkeztek. Az egyes kristályok morfológiája igen hasonló az 5b ábrán látható dendritekhez. A kristályok legnagyobb mérete 50–200  $\mu$ . A növesztés időtartama 4 nap



b)



fázis mikrokristályos, vagy amorf struktúrájú lesz. Ez az eset már nagyon közel áll a közönséges kémiai lecsapáshoz. Ilyen esetekben a nukleáció megindulása után a nukleációs tér rendkívül gyorsan expandál, és végeredményben homodiszperz, de igen kis méretű szilárd részecskék és aggregátumok keletkeznek a rendszer teljes térfogatában.

Itt szeretnék megemlékezni az aggregációs kondenzáció hatásáról. Azokban a rendszerekben, ahol a gócképződés a folyadékfázis belsejében indul meg, (l. pl. a 1b és 1c ábrán látható összeállítást) a növekvő göcök lassú kiülepedése következtében erős aggregáció lép fel. Ez természetesen hátrányosan befolyásolja a kristallitok növekedését. Ilyen esetekben előnyös szerves géleket (pl. zselatint, vagy agar-agart) alkalmazni közegként. Ilyenkor a göcök ülepedése nem indul meg, és megfelelő transzportsebességeknél az előzőekben bemutatott kristályokhoz hasonló méretű kristályok állíthatók elő.

A fenti hatáshoz hasonló effektus mutatkozik akkor is, ha a vizes közeg fajsúlyát és viszkozitását megfelelő anyagokkal megnöveljük. Itt már számolnunk kell a diffúziós viszonyok erős megváltozásával is, ui. a diffúzióállandók az Einstein—Stokes összefüggés értelmében fordítottan arányosak a viszkozitással. Ez azt jelenti, hogy a viszkozitás (és fajsúly) növelő anyagok (pl. glicerín) lecsökkentik a transzportsebességeket a tiszta, vizes közeghez képest. Ez az esetek egy részénél igen előnyös, ui. az eddig tárgyalt, állandó erősségű anyagforrásoknál (telített oldatok az oldódó anyag kristályainak jelenlétében) a kiindulási koncentrációk megváltoztatása nem áll módunkban. Ha az  $A_m B_n$  vegyület oldékonysága igen alacsony, akkor rendszerint mikrokristályos csapadék válik le, mivel általában az anyagforrásul használt vegyületek oldékonysága sok nagyságrenddel meghaladja a kiváló vegyület oldhatóságát.<sup>4</sup> A magas  $c_i^0$  értékek miatt a transzportsebesség akkora, hogy az utolsónak tárgyalt eset valósul meg. ZnS esetén pl., melynél  $K_s = 7,9 \cdot 10^{-26}$ , vizes közegben az előbbi okok miatt nem állíthatók elő megfelelő méretű kristályok. Víz, glicerín és ecetsav keverékében (3:6:1) már nagyobb kristályok képződése is megfigyelhető, melyek mérete elérheti az 1,0 mm-t is. A 9. ábrán egy ilyen, diffúziós úton növesztett ZnS kristály képe látható.

Lényegesen egyszerűbbek a viszonyok az 1a ábrán látható kísérleti elrendezésnél. Ennél a magképződés részben az anyagforrások peremén és külső falán indul meg, ezért az ülepedési aggregáció nem játszik lényeges szerepet. Míg az 1b és 1c típusú elrendezéseknél elsősorban a nukleációs folyamatok figyelhetők meg könnyen, addig az utóbbinál már a koncentrációgradiensnek a növekedésre gyakorolt hatását is figyelemmel kísérhetjük. Mn-ftalát kristályok növesztésénél megfigyelhető, hogy azokban a tartományokban, ahol  $(c_{krit} - c_r)$ , igen nagy, gyorsan növekvő, tű alakú kristályok nőnek. Kisebb különbség esetén ikerkristályok és lapok fejlődnek ki [9]. A 10. ábrán néhány, jellegzetes Mn-ftalát kristály látható, melyeket az 1a ábrán látható elrendezés segítségével állítottunk elő.

Lényegesen megváltoznak a viszonyok, ha az anyagforrás erőssége időben változó. Legáltalánosabb az az eset, amikor anyagforrásként a reagáló anyagok véges térfogatú oldatait használjuk fel, oldódó szilárd fázis jelenléte nélkül. Ilyenkor a diffúziós transzport és  $A_m B_n$  kiválása következtében az anyagforrás koncentrációja

<sup>4</sup> Igen alacsony oldhatóságú vegyületek kiválasztása anyagforrásként a rendkívül kis transzportsebességek miatt nem célszerű. Ilyen esetekben esetleg hónapok szükségesek megfelelő méretű kristály kifejlődéséhez.



időben állandóan csökken. Az  $A_m B_n$  alacsony oldhatósága miatt itt is elhanyagolva a reflexiót, a (2) egyenlet megoldásának kezdeti feltételei az egyik komponensre egydimenziós esetben:

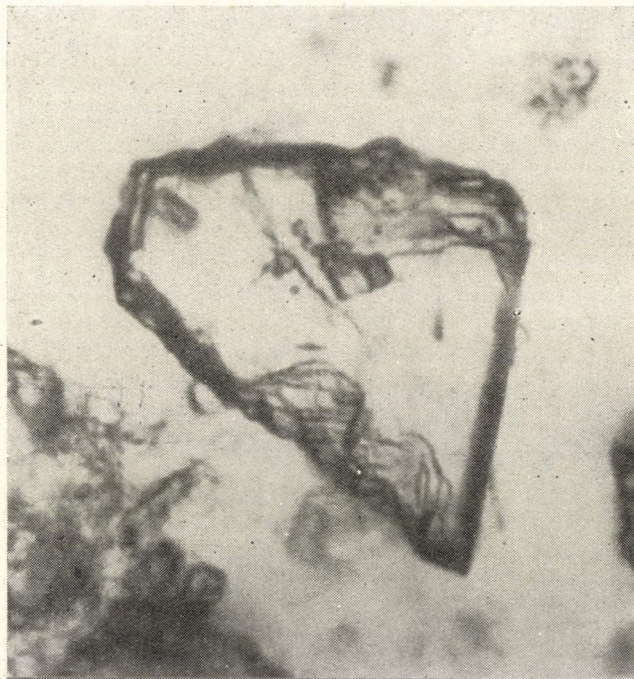
$$\begin{aligned} c(x, t) &= c_A^0 & a-h < x < h & \text{intervallumban} \\ c(x, t) &= 0 & x > (h) & \text{intervallumban } t=0\text{-nál,} \end{aligned}$$

ha a kiindulási oldat a folyamat kezdetén a  $-h < x < h$  intervallumot foglalja el. A probléma ismert megoldása [14]:

$$C(x_1 t) = \frac{1}{2} C^0 \left[ \operatorname{erf} \frac{h-x}{2(Dt)^{\frac{1}{2}}} + \operatorname{erf} \frac{h+x}{2(Dt)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (16)$$

Az eloszlás  $x=0$ -ra szimmetrikus, ezért szétvágható az eloszlás megzavarása nélkül. Az előzőekben már bemutatott egyszerű koordináta-transzformáció segítségével az  $L$  hosszúságú rendszer másik végén elhelyezett anyagforrás koncentráció-eloszlása is kiszámítható. A két eloszlás ismeretében az előzőekhez hasonlóan  $K(x, t)$  meghatározható a rendszer minden pontján.

Ellentétben az állandó erősségű anyagforrások esetével  $K(x, t)$  időbeli változása a  $0 < t < \infty$  intervallumban maximumot mutat. A 11. ábrán egy lineáris rendszer három különböző pontjában ábrázoltuk  $K(x, t)$ -t az idő függvényében. Jól

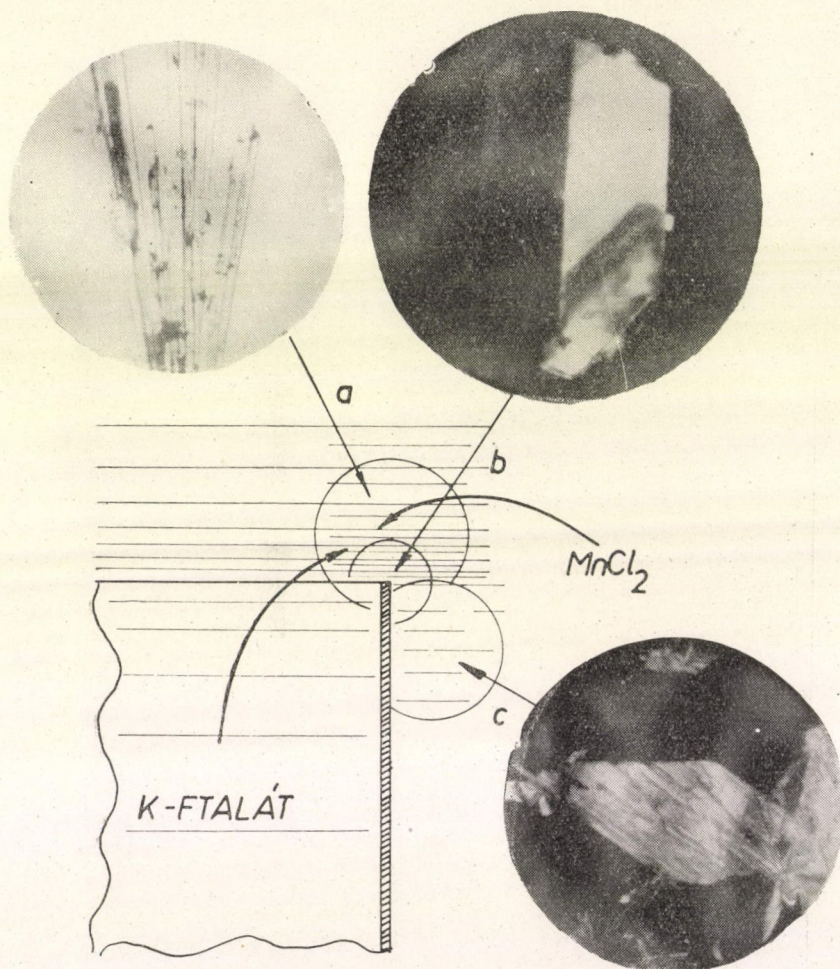


9. ábra. Diffúziós úton előállított ZnS kristály. A növesztő közeg víz-glicerín-ecetsav elegy volt. A kristály legnagyobb mérete 1,0 mm, a növesztés időtartama 9 nap



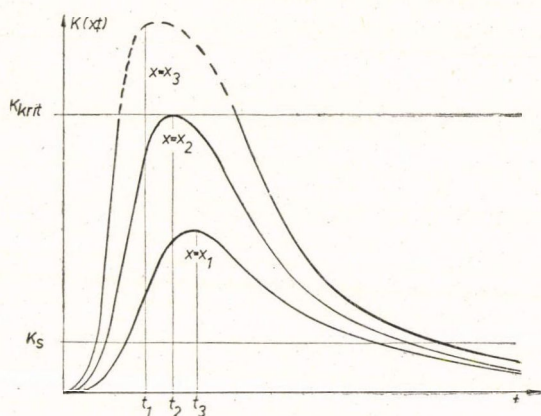
látható, hogy ha a közeget végtelen nagynak tekintjük,  $K(x, t)$  kétszer éri el  $K_{krit}$  és  $K_s$  értékét. Ez azt jelenti, hogy a rendszer adott pontján pontosan megállapítható az anyagkiválás megindulása (az a  $t$  pillanat, amikor  $K(x=x_i, t)=K_{krit}$ ) és vége, azaz a  $t$  idő, amikor  $K(x=x_i, t)=K_s$ . A maximum különböző  $x$ -ekre időben eltolódva jelentkezik.

A görbék lefutásából néhány fontos következtetés vonható le a kristályképződéssel kapcsolatban. Az egyik az, hogy kis  $t$ -knél  $K(x, t)$  rendkívül meredek emelkedése miatt azokban a tartományokban, ahol a függvény túlszakad  $K_{krit}$  értékén,

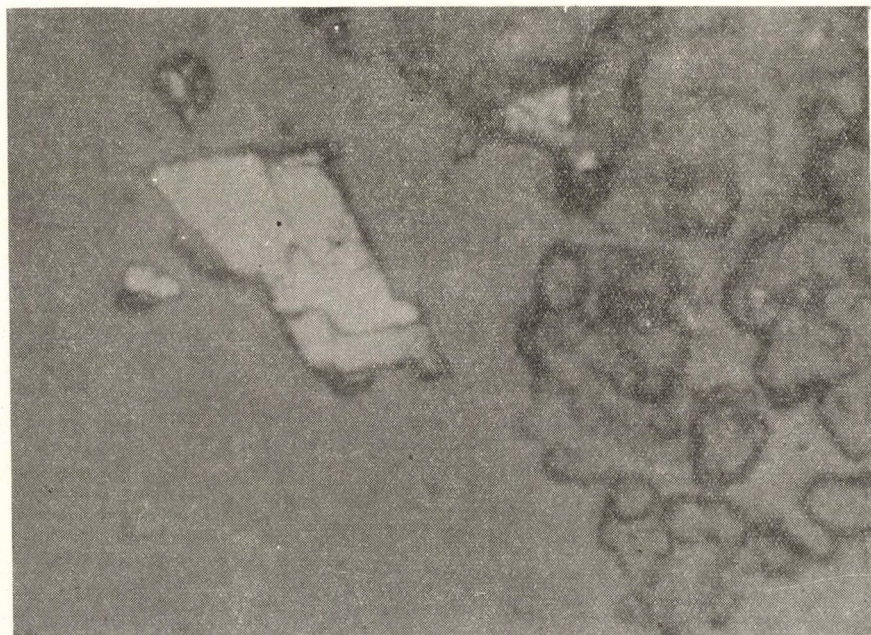


10. ábra. Diffúziós úton előállított, különböző Mn-ftalát kristályok. A kristályok az 1a ábrának megfelelő elrendezésű rendszerben, a ftalát iont szolgáltató anyagforrás peremén nőttek. A tűk (a) mérete 0,5–1,0 cm, a szabályos, iker-lapoké (b) 0,01–0,1 cm, a nagy, szabálytalan lapoké (c) pedig 0,1–0,3 cm. A különböző kristályok térben elkülönülve, a különböző koncentráció-gradiensű tartományokban fejlődtek ki. A növesztés ideje 4 nap





11. ábra. Időben csökkenő erősségű anyagforrások által létrehozott koncentrációsorlat időfüggése a növesztő tér különböző pontjain



12. ábra. Csökkenő erősségű anyagforrások felhasználásával előállított ZnS. A felvétel polarizált fényben készült. A képen látható nagy kristály mérete  $\sim 0,1$  cm. A mikrokristályos csapadék alig különböztethető meg a háttértől. A növesztő közeg víz-glicerín-ecetsav elegy volt, a növesztés ideje 9 nap



a nukleáció sebessége igen nagy lesz, itt nem várható makrokristályok keletkezése. Ott, ahol  $K(x, t)$  éppen eléri, vagy csak kissé haladja meg az említett értéket, nagy kristályok keletkezése is lehetséges. Ez a rendszerben csak néhány, kitüntetett ponton valósulhat meg. Minden olyan tartományban, ahol

$$K(x, t_{\max}) \gg K_{\text{krit}} \quad (17)$$

mikrokristályos csapadék keletkezik. Ott, ahol

$$K(x, t_{\max}) = K_{\text{krit}} \quad (18)$$

kevés góc keletkezik, és a keletkezett gócok lassú növekedését a csökkenő transzport biztosítja. Ez a lassú növekedés a  $K(x, t)$  görbe asszimptotikusan  $O$ -hoz tartó szakaszán aránylag nagy kristályok keletkezését is lehetővé teszi. Ezek a folyamatok azt eredményezik, hogy a kiváló, szilárd fázis kristályainak méreteloszlása egészen szélsőséges lesz. Igen kis és viszonylag nagy kristályok keletkeznek, de a közbeeső tartomány hiányzik a méretspektrumból. Egy ilyen rendszer képe látható a 12. ábrán. A felvétel polarizált fényben készült, ZnS kristályok növesztésénél. Anyagforrásként  $\text{ZnSO}_4$  és  $\text{Na}_2\text{S}$  oldata szolgált. A növesztő közeg glicerín-víz-ecetsav elegy volt. Keresztezett nicoloknál csak a nagy kristályok láthatók jól, a mikrokristályos fázis erősen beleolvad a háttérbe.

Különösen kedvezően alakulnak a viszonyok akkor, ha a kezdeti  $c_i^0$  koncentrációkat és a rendszer geometriáját úgy választjuk meg, hogy  $K(x, t)$  a növesztés teljes időtartama alatt csak meghatározott, kis környezetben érje el  $K_{\text{krit}}$  értékét. Ez azt jelenti, hogy az egész rendszerben csupán néhány góc keletkezik. Az ilyen gócok növekedésének csupán a rendszerben levő anyag kis koncentrációja szab határt.

#### IRODALOM

- [1] J. Johnston, J. Am. Chem. Soc. 36, 16, 1914.
- [2] W. C. Frenelius és K. D. Detting, I. Chem. Educ. 11, 176, 1934.
- [3] L. G. Berg, Proc. Royal Soc. 164, 79, 1938.
- [4] W. Rathje, Ber. Dtsch. chem. Ges. 74. 342, 1941.
- [5] E. Anastasiadis, Neue Hütte 2, 425, 1957.
- [6] R. A. Lefever, J. Electrochem. Soc. 108, 107, 1961.
- [7] H. G. Grimmeis, N. Kischio és A. Rabenau, J. Phys. Chem. Solids 16, 302, 1960.
- [8] L. G. van Uitert és R. G. Treuting, J. Chem. Phys. 32, 322, 1960.
- [9] E. Lendvay, Acta Phys. Hungar. (közlés alatt).
- [10] S. Lewin, The Solubility Product Principle Isaac Pitman and Sons, Ltd., London, 1960.
- [11] D. H. Klein és L. Gordon, Talanta, 3, 187, 1959.
- [12] E. Lendvay, Acta Phys. Hungar. (közlés alatt).
- [13] C. O. Bennett és J. E. Myers, Momentum, Heat and Mass Transfer, McGraw Hill Book Co. Inc. New York, 1962.
- [14] J. Crank, The Mathematics of Diffusion, The Clarendon Press, Oxford, 1956.





# DINAMIKUS MAGSTRUKTÚRA EFFEKTUSOK BELSŐ KONVERZIÓNÁL\*

BERÉNYI DÉNES

MTA Atommag Kutató Intézete, Debrecen

## 1. Bevezetés

A radioaktív bomlás folyamán különböző sugárzások és részecskék ( $\gamma$ -sugárzás,  $\alpha$ -részek, neutrínók stb.) jönnek létre és lépnek ki az atomból, illetve az atommagból. Az ezeket vizsgáló atommagspektroszkópiának a feladata kettős. Egyrészt tisztázni kell magukat a bomlási folyamatokat, részecske emittálási jelenségeket, másrészt a kilépő részecskék és sugárzások sok irányú vizsgálatán keresztül következtetéseket levonni az atommag belsejére, belső szerkezetére vonatkozóan.

Az egyes bomlási folyamatok tisztázása azt jelenti, hogy felderítjük magát a kölcsönhatást, amelyik a sugárzás vagy részecske kilépését előidézi, továbbá azt, hogy le tudjuk írni a jelenséget minden részletében, pl. mindenek előtt a folyamat létrejöttének valószínűségét, továbbá a kilépő sugárzás energia- és szögeloszlását, időbeli lefutását és elágazási viszonyait. Természetesen ezeket a megfigyelhető paramétereket erősen befolyásolják a konkrét mag tulajdonságai és éppen ez ad lehetőséget a különböző magmodellekkel való összehasonlításra. Nyilvánvaló, hogy annál jobban használhatunk egy jelenséget a magstruktúra felderítésére, minél világosabban állnak előttünk magának a jelenségnek a törvényszerűségei.

Ismeretes, hogy ma még elég messze vagyunk attól, hogy a mag belső szerkezetét minden részletében ismeretesnek tekinthetnénk. Ugyanakkor, bármennyire is viszonylag régen ismeretes maga a radioaktivitás, az egyes radioaktivitással összefüggő folyamatok, jelenségek részletei sok tekintetben még ma is tisztázatlanok. Legvilágosabban a  $\gamma$ -emisszió törvényszerűségeit ismerjük, viszont igen sok a tisztázatlan kérdés pl. a belső fékezési sugárzások, a két kvantum  $\gamma$ -emisszió (és más ún. másodrendű folyamat) jelenségével vagy az elektron befogás és a pozitron emittálás elágazási viszonyával kapcsolatban. A belső konverzió jelensége is erősen az érdeklődés előterébe került az utóbbi évtizedben és a vele kapcsolatos problémák még ma se záródtak le távolról sem.

## 2. Történelmi áttekintés és problémafelvetés

Már a radioaktivitás felfedezésének második évtizedében (1910, 1911, 1912) kimutatta von *Baeyer*, *Hahn* és *Meitner* homogén elektron csoportok jelenlétét a  $\beta$ -sugárzásban. Ez a „vonalas  $\beta$ -spektrum” részletes vizsgálatok tárgya lett a természetes radioaktív elemeknél századunk 10-es és 20-as éveiben (*Danysz*, *Rutherford*, *Robinson*) [1].

*Meitner* és *Ellis* 1922-ben felállították a vonalak energiájára ( $E_i$ ) vonatkozó alapvető összefüggést

$$E_i = W - B_i, \quad (2.1)$$



amely szerint, ha a homogén elektron csoportok energiájához hozzáadjuk megfelelően a szóban forgó atom elektron héjainak kötési energiáit ( $B_i$ ), akkor egy konstans értéket kapunk ( $W$ ), amely éppen megfelel egy ugyancsak kibocsátott gamma-sugár energiájának. Amennyire fontos rendező elvnek és vizsgálati módszernek (a  $\gamma$ -sugarak energiaspektrumának vizsgálatánál) bizonyult a (2,1) összefüggés, annyira félrevezető volt alaki egyezése a fotoelektromos egyenlettel. Ennek volt köszönhető, hogy majd a 30-as évek közepéig, a pontosabb kvantummechanikai számítások elvégzéséig tartotta magát az a felfogás, hogy a monoenergetikus elektron vonalak létrejötte belső fotoeffektus eredménye, amikor is a magból kilépő  $\gamma$ -sugár a saját atomhéjából vált ki fotoeffektus révén elektronokat. A számítások azonban bebizonyították, hogy egy ilyen elképzelés távolról se tudja megmagyarázni az észlelt elektron vonalak intenzitását. A jelenséget helyesen, csak mint belső konverziót lehet értelmezni, amelyben a gerjesztett állapotban levő mag az elektromágneses téren keresztül közvetlen kölcsönhatásba kerül a saját burok-elektronjaival, anélkül, hogy gamma-sugárzás emissziója bekövetkeznék. A gamma-foton emissziója és a belső konverziós elektron kilépése tehát alternatív, egymással versengő módjai a magnívók legerjesztődésének [2].

A későbbiek folyamán nyilvánvalóvá lett, hogy a belső konverziós vonalak, de még inkább a megfelelő belső konverziós koeficiensok vizsgálata rendkívül alkalmas eszköz arra, hogy a magok gerjesztett nívóinak tulajdonságait (energia, spin, paritás) felderítsük általa.

A mag kicsisége miatt az atom méreteihez képest, feltételezhető volt, hogy a mag és a konkrét burok-elektron közti kölcsönhatás túlnyomó valószínűséggel a magon kívüli térben történik, tehát a mag ilyen szempontból *pontszerűnek* tekinthető. A kölcsönhatás az elektromágneses téren keresztül történik. A konverzió valószínűsége függ az elektron hullámfüggvényétől, továbbá a mag fontosabb külső tulajdonságaitól, mint a rendszám, és a kérdéses nívók energiája, spinje és paritása, de a belső magstruktúrától való függés, a mag matrix elem, ugyanaz, mint a  $\gamma$ -átmenet esetében. Így ha kísérletileg az egyes héjakra történő konverziós események számát az alternatív létrejött  $\gamma$ -átmenetek számához viszonyítva vizsgáljuk, akkor az így kapott  $\alpha_i$ ,

$$\alpha_i = \frac{N_{ei}}{N_\gamma}, \quad (i = K, L_I, L_{II}, L_{III}, \dots) \quad (2,2)$$

(ahol  $N_{ei}$  egy adott átmenetben az  $i$ -edik, pl.  $K$ ,  $L_I$ ,  $L_{II}$  stb. héjról kilépő konverziós elektronok száma,  $N_\gamma$  pedig az összes kibocsátott  $\gamma$ -fotonok száma) konverziós koeficiensok a mag belső szerkezetétől (pl. héjakba rendeződés stb.) függetlenek lesznek (a hányados képzésénél a magstruktúra függést hordozó  $\gamma$ -matrix elemek ugyanis kiesnek) és csak a mag, ill. az egyes magállapotok olyan paramétereitől függenek, mint energia, spin és paritás.

Úgy látszott tehát, hogy a konverziós koeficiensok tanulmányozása segítségével a mag belsejéről tett modellszerű feltevések nélkül meghatározhatók a gerjesztett nívók legfontosabb paraméterei, amelyek azután megbízható alapul szolgálhatnak a felállítandó magmodellek számára.

Ahhoz azonban, hogy a konverziós koeficiensok módszerét kiterjedten lehessen alkalmazni, szükség volt olyan numerikus táblázatokra, amelyekben a fenti elvi alapokon különböző  $Z$ -knél az átmeneti energia és a multipolaritás (azaz a spin és paritás változás) függvényében numerikusan ki vannak számítva a konverziós koefi-



ciens elméleti értékei az egyes atomhéjakra. A kísérleti értékeknek éppen ezekkel az elméleti adatokkal való összehasonlításából lehet az egyes nívók spinjét és paritását meghatározni.

Az első ilyen táblázatot *Rose* és munkatársai állították össze a K-héjra [3–5] 1949-ben, a magot pontszerűnek feltételezve és a pontszerű mag terének megfelelő Dirac elektron hullámfüggvényeket használva. Ezeket a táblázatokat azután — a pontszerű magra vonatkozó alapvető feltevést megtartva — tovább tökéletesítették, figyelembe véve az elektronburok árnyékoló hatását a magtöltésre és kiterjesztve a számításokat magasabb héjakra is [6].

Hamarosan azonban mind elméleti [7, 8] mind kísérleti [9–11] oldalról komoly érvek merültek fel azzal kapcsolatosan, hogy nem helyes a magot pontszerűnek tekinteni. Ugyancsak rámutattak már 1956-ban is (*Church* és *Weneser* [12, 13]), hogy bizonyos esetekben, amikor a  $\gamma$ -átmenet erősen tiltott, vagy egyáltalán nem jöhet létre ( $0 \rightarrow 0$  átmenetek), fontos szerepet kaphat a mag belső struktúrája is a konverzió létrejöttében.

Ezek alapján új táblázatok készültek, amelyek figyelembe vették a magok véges méretét. Éspedig *Sliv* és munkatársai [14, 15] egyenletes töltés eloszlású gömböt feltételeztek, ezáltal sikerült kiküszöbölni az elektron hullámfüggvényekben az  $r=0$  helyen fellépő szingularitást és ugyanakkor a mag véges töltéseloszlásának megfelelő realisabb hullámfüggvényeket használni. Ezek az ún. *sztatikus magstruktúra effektusok* belső konverziónál. Ugyanilyen feltételezések alapján (tehát a sztatikus magstruktúra effektusok figyelembevételével) új táblázatokat készített *Rose* is [16]. *Rose* ebben az új táblázatában is zérusnak tekintette azonban azokat az új matrix elemeket, amelyek felmerülnek akkor, ha figyelembe vesszük, hogy a kicsi, de véges méretű mag belsejében kölcsönhatás jöhet létre a mag töltések és áramok, valamint a konvertálódó héj elektron között — ha általában viszonylag kis valószínűséggel is. Ebben az esetben a konverzió létrejöttének valószínűsége függeni fog (általában csak igen kis mértékben) a mag belső szerkezetétől is és ezek lesznek az ún. *dinamikus magstruktúra effektusok*. Azok az új mag matrix elemek pedig, amelyek leírják a magon belüli kölcsönhatás (amelyeknek a formája különbözik a magon kívüli kölcsönhatásától) következtében létrejövő belső konverzió valószínűségét, a *penetrációs matrix elemek*. Ez utóbbiak nemcsak a belső konverziós koeficiensek számításánál jelentkeznek, hanem a konverziós elektronok különböző szögkorrelációs kifejezéseiben is.

*Sliv* és munkatársai számításaikban a mag belsejére (pontosabban az átmeneti áramokra a mag belsejében) azt az egyszerű modellt feltételezték, hogy a mag átmeneti áramok<sup>1</sup> teljes egészükben a mag felületén helyezkednek el (*felületi áram közelítés*) és [14, 15] táblázatukat is ilyen alapon számolták. (Ugyanezek a táblázatok megtalálhatók [17]-ben is.) Ilyen feltételezés mellett a penetrációs matrix elemek ismét arányosak lesznek a  $\gamma$ -sugárzási matrix elemmel, éppúgy, mint a non-penetrációs tag (lásd előbb), és a konverziós koeficiens kifejezéséből a magstruktúra függés éppen úgy ki fog esni, mint a pontszerű mag közelítésnél. *Sliv* és munkatársai tehát táblázatukban nemcsak a sztatikus magstruktúra effektusokat vették figyelembe, hanem a dinamikus magstruktúra effektusokra vonatkozólag is

<sup>1</sup> Az átmeneti áramot azért kell hangsúlyozni, mivel a mag egyik állapotából a másikba történő átmeneténél fellépő áramokról van itt szó, nem pedig egy adott magállapotban is pl. a protonok pályamozgásából feltételezhető „sztatikus” áramról.



alkalmaztak egy közelítést számításaikban. Ezeket a számításokat azonban csak a K és L héjakra végezték el, míg Rose táblázata [16] az M-héjakra ( $M_I$ ,  $M_{II}$ ,  $M_{III}$ ,  $M_{IV}$  és  $M_V$ ) is tartalmaz adatokat (bár ez utóbbiakra a véges magméret és az árnyékolási korrekció figyelembe vétele nélkül).

A *Sliv* és munkatársai, valamint *Rose* legújabb táblázatában megadott adatok általában elég jó egyezést mutatnak egymás között és a kísérleti adatokkal is (lásd *Lisztengarten* összefoglaló áttekintését [32]), mivel a penetrációs effektusok a „felületi áram közelítésben” csak néhány %-os korrekciót adnak a konverziós koeficiens értékéhez [18]. Megemlítjük, hogy legújabban (*Hollander*, 1963 [19] és *Lisztengarten*, 1964 [20]) egyes esetekben elég komoly eltérésekről számoltak a két táblázat között. A véges mag méretek figyelembe vétele a pontszerű mag közelítés helyett 30–50-szeres, sőt ennél nagyobb eltéréseket is adhat (pl. nehéz elemekben M1 átmenetknél a K konverziós koeficiensre) [17, 18, 21].

Vannak azonban olyan esetek is, amelyekben, mint már említettük, a  $\gamma$ -átmenet intenzitását valamilyen tiltás erősen lecsökkenti, és ugyanez nem hat a penetrációs matrix elemekre. Ilyenkor a belső konverzió valószínűsége és a belső konverziós koeficiens értéke erősen függ a mag belső szerkezetétől, a kapott elméleti érték pedig erősen modell függő, függ a mag belső szerkezetére, az átmeneti mag áramokra tett konkrét feltevésektől, ellentétben az esetek nagy többséget kitevő modell független belső konverziós eseményekkel. Az olyan belső konverziós mérések (koeficiens meghatározása és szöghkorrelációs vizsgálatok), amelyekben a dinamikus magstruktúra effektusok jelentkeznek, hasonló eszközt adnak kezünkbe a mag-szerkezet felderítésére, mint *Hofstadter* nagy energiájú szórás kísérletei [18, 22]. Fontosak továbbá az ilyen jellegű vizsgálatok azért is, mert ezek segítségével igazolhatjuk vagy továbbfejleszthetjük magát a belső konverzió jelenségét leíró elméletet. Dolgozatunk további részében a dinamikus magstruktúra effektusok kimutatására, a penetrációs matrix elemek meghatározására vonatkozó elméleti és kísérleti eredményeket fogjuk összefoglalni és analízálni.

### 3. Elméleti alapok

A magstruktúra hatását a belső konverzió jelenségére — mint már említettük — először *Church* és *Weneser* vetette fel 1956-ban [12, 13], majd a probléma elméletét *Green* és *Rose* [23, 24], fejlesztették tovább. Külön az M1 átmenetekkel foglalkozott azután *Reiner* [25], *Kisslinger* [26] és *Grecsukin* [27], míg az E1 átmeneteket *Nilsson* és *Rasmussen* [28], *Church* és *Weneser* [29], továbbá *Kramer* és *Nilsson* [30] analízálta. Legújabban a magasabban tiltott elektromos és mágneses átmeneteket *Boriszoglebszkij* vizsgálta meg részletesebben [31]. A továbbiakban ezek alapján foglaljuk össze a belső konverzió jelenlegi, a magstruktúra effektusokat is figyelembe vevő elméletét.

A konverziós elektronok kilépésének valószínűségét egy  $k$  kezdeti állapotból egy  $v$  végállapotba történő átmenetben az  $U_{vk}$  átmeneti matrix elem abszolút értékének a négyzete,  $(U_{vk})^2$  adja meg a kvantummechanikában ismeretes módon.  $U_{vk}$ -t szimbolizálva a következőképpen írhatjuk fel

$$U_{vk} = \int_0^{R_0} A_{\text{belső}} + \int_{R_0}^{\infty} A_{\text{külső}}, \quad (3,1)$$



ahol  $R_0$  a magsugár,  $\mathbf{A}$  a vektor potenciál a magon belül, ill. azon kívül. A második tag pl. részletesebben kiírva

$$\int_{R_0}^{\infty} \psi_v^+ \vec{\alpha} \mathbf{A}_l \psi_k d\tau.$$

Itt  $\psi$ -k az elektron hullámfüggvényei,  $\vec{\alpha}$  a Dirac-matrix és az „ $l$ ” index az átmenet multipolaritását jelzi. Ha most (3,1)-et sorba fejtjük a multipolok szerint, akkor a mágneses és elektromos tagokat szétválasztva a következő kifejezéshez jutunk [18]

$$U_{vk} = \sum_{\substack{L=l \\ L, M}}^{\infty} U_{\text{mág}}(L, M) + \sum_{\substack{L=l \\ L, M}}^{\infty} U_{el}(L, M) + U_{el}(L=0), \quad (3,2)$$

ahol  $L$  a teljes impulzuszómomentum az átmenetre és  $M$  ennek a  $Z$ -komponense.

A következőkben a tagok különböző csoportjait, azaz a mágneses, az elektromos multipolokat és az elektromos monopól esetét célszerű külön tárgyalni különböző tulajdonságaik miatt.

#### a) Mágneses multipól átmenetek

Megfelelő átalakítások után a következőképpen írhatjuk fel részletesen a matrix elemet mágneses multipól átmenetekre (az  $\mathbf{A}_{LM}$  és  $\mathbf{B}_{LM}$  az álló és kimenő hullám vektor potenciálok)

$$\begin{aligned} U_{\text{mág}}(L, M) = & -4\pi i k \left[ \int_0^{\infty} d\tau_n \mathbf{j}_n \cdot \mathbf{A}_{LM}^{(m)*}(k\mathbf{r}_n) \int_0^{\infty} d\tau_e \mathbf{j}_e \mathbf{B}_{LM}^{(m)}(k\mathbf{r}_e) \right] + \\ & + 4\pi i k \left[ \int_0^{\infty} d\tau_n \mathbf{j}_n \mathbf{A}_{LM}^{(m)*}(k\mathbf{r}_n) \int_0^{r_n} d\tau_e \mathbf{j}_e \mathbf{B}_{LM}^{(m)}(k\mathbf{r}_e) \right] - \\ & - \int_0^{\infty} d\tau_n \mathbf{j}_n \mathbf{B}_{LM}^{(m)*}(k\mathbf{r}_n) \int_0^{r_n} d\tau_e \mathbf{j}_e \mathbf{A}_{LM}^{(m)}(k\mathbf{r}_e) \end{aligned} \quad (3,3)$$

amelyben a  $\mathbf{j}$ -k az elektron, ill. a mag átmeneti áramsűrűségét jelentik, míg az  $\mathbf{r}$ -ek a megfelelő helykoordináták; a  $k$  a kezdeti és végső magállapot energiakülönbsége.

A fenti kifejezésben az első tag írja le a magon kívüli kölcsönhatást, azaz felelős azért a belső konverzióért, amely a mag töltések és áramok, valamint a konveráló elektron között a magon kívüli térben létrejön. A másik két tag viszont azt a kölcsönhatást írja le, amelyik a mag térfogatán belül történik. Ezek az ún. *penetrációs tagok*.

Ebből következik, hogy „pontoszerű mag” közelítés esetén — nyilvánvalóan csak az első tag zérustól különböző. Kvalitatíve, minden mélyebb megfontolás nélkül, az várható, hogy általában az első tag túlnyomó nagy súllyal kell szerepeljen a penetrációs tagokhoz képest, a mag térfogatának viszonylagos kicsisége miatt a magon kívüli térhez, pontosabban az atommaghoz közeli térfogatához képest, ahol a belső konverziós kölcsönhatás a legnagyobb valószínűséggel létrejöhet.



A (3,3) kifejezés első tagjának, az ún. *nonpenetrációs matrix elemeknek* igen fontos tulajdonsága, hogy két faktorra szeparálódik, amelyek közül az egyik csak a mag, illetőleg a magállapotok közti átmeneti töltés és árameloszlás, a másik pedig csak a konvertálódó elektron tulajdonságaitól függ. A mag tulajdonságaitól függő faktor pedig éppen a gamma-matrix elem, azaz az a mag matrix-elem, amelyik megadja a  $\gamma$ -sugárzás kibocsátásával történő átmenet valószínűségét:

$$M_{\gamma} = \int_0^{\infty} d\tau_n \mathbf{j}_n \mathbf{A}_{LM}^{(m)*}(k\tau_n). \quad (3,4)$$

Mint ismeretes a konverziós koeficiens, amelynek a meghatározása a kísérletek tulajdonképpen tárgya szokott lenni, a (2,2) definíció szerint az adott héjról kilépő konverziós elektronok száma osztva az összes  $\gamma$ -sugárzás kibocsátásával történő átmenetek számával. A kibocsátott konverziós elektronok, illetőleg  $\gamma$ -kvan tumok száma viszont a megfelelő matrix elemek négyzetével arányos. Így ha (3,3)-at egyszerűsített formában írjuk fel

$$M_{ei} = T_{ei}^{(m)} T_{ei}^{(e)} + T_{ei}^{(p)} = T_{ei} + T_{ei}^{(p)} \quad (3,5)$$

$$T_{ei} = T_{ei}^{(m)} T_{ei}^{(e)}$$

(ahol  $M_{ei}$  a konverziós folyamat teljes matrix eleme, — jelen esetben  $M_{ei} = U_{\text{mág}}(LM)$  —,  $T_{ei}^{(m)}$  csak a mag,  $T_{ei}^{(e)}$  pedig csak az elektron tulajdonságaitól függő tag.  $T_{ei}^{(m)} = M_{\gamma}$  a  $\gamma$ -matrix elemnek,  $T_{ei}^{(p)}$  a penetrációs tagnak — ez tartalmazza a penetrációs matrix elemeket — a jelölése,  $T_{ei}$ -t szokás fő-konverziós tagnak nevezni). Nyilvánvaló, hogy „pontoszerű mag” közelítés esetén, amikor  $T_{ei}^{(p)} = 0$ , a konverziós koeficiens kifejezéséből a mag belső tulajdonságaitól való függés  $T_{ei}^{(m)} = M_{\gamma}$  miatt ki fog esni. Így tehát analitikusan is belátható, hogy mi okozza azt, hogy a konverziós koeficiens első közelítésben független a mag belső tulajdonságaitól.

A „pontoszerű mag” közelítést javítani lehet, ha megtartjuk ugyan a penetrációs tagok zérus voltára vonatkozó feltevést, de a magot véges méretűnek tételezzük fel. Ezt tette *Rose* újabb táblázatában [16], amelyben a számításokat úgy végezte el, hogy a magot  $R = 1,2 \text{ A}^{1/3} 10^{-13} \text{ cm}$  sugarú homogén töltés eloszlású gömbnek tekintette és a véges magméretnek megfelelő elektron hullámfüggvényeket használt és ezzel eltüntette a mag helyen ( $r=0$ ) jelentkező és a konverziós koeficiensek valódi értékétől jelentős eltérést eredményezhető szingularitásokat. Így eljárva az ún. *sztatikus magstruktúra effektusokat* vesszük figyelembe. Ezek főleg a nehezebb elemek alacsonyabb mágneses átmeneteinél okoznak komolyabb változást, és pedig csökkenést, pl. az M1 K-konverziós koeficienseknél kirívó esetben esetleg 200% is lehet az eltérés [17], általában azonban a nehéz magoknál is csak 30–50% [18, 21]. Az 1. ábra jól szemlélteti a véges méret figyelembevételének hatását, bár itt egy előbb már említett és a továbbiakban részletesebben is kifejtendő korrekció, a „felületi áram közelítés” is bele van foglalva, de ez utóbbi legfeljebb csak néhány %-os hozzájárulást jelenthet.

Érdekes azonban, hogy a számítások szerint [18] a konverziós koeficiensek értéke nem érzékeny a sugár számértékének megválasztására. Ha pl. a sugarat



az előbb megadott  $R$ -nél 10%-kal nagyobbra választjuk, akkor egy nehéz magban létrejövő M1 átmenetre, ahol a két közelítés közt a különbség 70% volt, a nagyobb sugárral számolva csak mintegy 2%-kal kapunk kisebb értéket. Még ennél is kisebb hatással van a konverziós koeficiens értékére, ha a számításoknál felhasználjuk a mag diffúz határfelületére vonatkozó nagy energiájú elektron szórásból adódó eredményeket [22]. Amennyire a számítások mutatják (csak a  $K$ -héjra vizsgáltak Church és Wenner [33]) a mag gömb alaktól eltérő deformált alakja, tehát nagy elektromos kvadrupól momentuma vagy mágneses dipól momentuma szintén nem okoz gyakorlatilag lényegesebb eltérést a konverziós koeficiensnek értékében [18].

A sztatikus magstruktúra effektusok tekintetében *Sliv* és munkatársai [14, 15] *Rose* itt kifejtett feltételezéseivel teljesen azonosakat fogadtak el táblázatuk számításában. Azonban a penetrációs matrix elemeket sem tekintették minden további nélkül nullának, hanem egy igen egyszerű modellrel, a „felületi áram közelítést” alkalmazták.

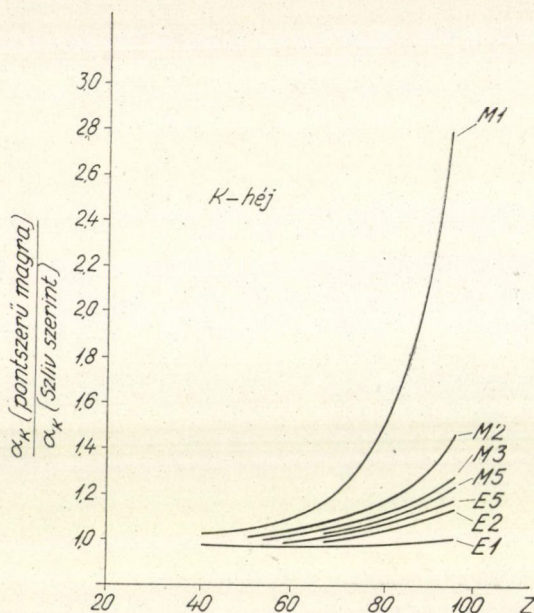
A (3,3) kifejezésben a két penetrációs tagot fel lehet írni a következő alakban is

$$T_{ei}^{(p)} = 4\pi i k \int_0^\infty \left\{ d\tau_n \mathbf{j}_n A_{LM}^{(m)*}(k\mathbf{r}_n) \left[ \int_0^{r_n} d\tau_e \mathbf{j}_e B_{LM}^{(m)}(k\mathbf{r}_e) - \frac{h_L^{(l)}(kr_n)}{j_L(kr_n)} \int_0^{r_n} d\tau_e \mathbf{j}_e A_{LM}^{(m)}(k\mathbf{r}_e) \right] \right\} \quad (3,6)$$

vagy az elektron függvények szögfüggésére integrálva

$$T_{ei}^{(p)} = B(e) \int_0^\infty d\tau_n \mathbf{j}_n A_{LM}^{(m)*}(k\mathbf{r}_n) C(r_n) = B(e) M_p \quad (3,7)$$

Itt tehát nem végezhető el a szeparáció a mag és az elektron tulajdonságoktól függő tényezőkre úgy, mint a fő konverziós tag esetében, hogy a magtól függő rész éppen a  $\gamma$ -matrix elem legyen. Itt egy új mag matrix elem  $M_p$ , az ún. penetrációs matrix elem lép fel. Mint látjuk ez a  $\gamma$ -matrix elemtől egy az integrál alatti  $C(r_n)$  súlyfügg-



1. ábra. A mag véges méretét és a dinamikus magstruktúra effektusokat „felületi áram” közelítéssel figyelembevevő *Sliv*-féle számítások hatása a  $K$ -konverziós koeficiensre  $Z$  függvényében  $k=0,5$  energiánál (természetes egységekben)



vényben különbözik. Így (3,6)-ot a konverziós koeficiens képzésénél a gamma matrix elemmel beosztva az adódó tag magstruktúra függő marad, nem úgy, mint a non-penetrációs tag esetében, ahol a konverziós koeficiensben a magstruktúra függés kiesik. A konverziós koeficiens kifejezésének így adódó penetrációs tagja csak konkrét magmodellek feltételezésével értékelhető ki. A modell viszont tartományról tartományra, sőt esetleg magról magra is változhat, de egy magon belül is különböző lehet az egyes átmenetek esetében. Így tehát kilátástalan feladat lenne egy konverziós koeficienset tartalmazó táblázat számításához hozzáfogni. *Sliv* közelítése szerint viszont minden átmeneti áram a magban a gömb alakú felületen helyezkedik el, ami azt jelenti, hogy a (3,3), (3,6) és (3,7) formulában az  $r_n$  helyébe  $R$ , konstans érték helyettesítendő. Ennek megfelelően a (3,7) penetrációs matrix elemben is a gamma matrix elem egy konstanssal lesz szorozva, tehát végül is az ezen feltevés alapján számított konverziós koeficiens magstruktúra független lesz ismét és így táblázat készíthető. Ilyen táblázat *Sliv* és *Band* 1956-ban a  $K$ -héjra [14] és 1958-ban az  $L$ -héjakra [15] kiadott és e cikkben előzőleg már többször idézett táblázata.

Figyelemreméltó — mint már szintén szó volt róla —, hogy az ilyen feltevés alapján számolt penetrációs tagok csak néhány százalékát teszik ki a non-penetrációs tagnak.

A kísérletek azonban már elég korán, pl. a  $Tl^{203}$  279 keV-os  $M1$  átmenete esetében már 1956-ban [10], majd még határozottabban a  $Ta^{181}$  137 keV-os  $M1$  átmeneténél (Snyder és Frankel, 1957 [34]) jelezték, hogy egyes átmeneteknél a *Sliv*-féle korrekciók ellenére is eltérés adódik az elméleti értéktől, amit feltehetően a *Church* és *Weneser*-féle dinamikus magstruktúra effektusok okoznak.

Mindenekelőtt az a kérdés merül fel, hogy elméletileg meg lehet-e mondani előre, hogy hol várhatók ilyen „anomáliák”, másrészt, hogy az ilyen esetek analizéséből hogyan és milyen következtetéseket vonhatunk le a mag belső szerkezetére vonatkozólag.

Ehhez vizsgáljuk meg kissé közelebből a (3,7) penetrációs tagot. Ez egy bizonyos az elektron tulajdonságaitól függő faktorból és egy új magmatrix elemből áll, mint láttuk. Az új magmatrix elem, a penetrációs matrix elem az, amelyik a dinamikus magstruktúra effektusok befolyását érvényesíti a belső konverzió valószínűségének kifejezéséhez. Ennek a penetrációs matrix elemnek és a gamma matrix elemnek a hányadosa az ún. *penetrációs paraméter*, amelyet  $\lambda$ -val jelölünk.

$$\lambda = \frac{\int d\tau_n \mathbf{j}_n \mathbf{A}_{LM}^{(m)*}(\mathbf{k}\mathbf{r}_n) C(r_n)}{\int d\tau_n \mathbf{j}_n \mathbf{A}_{LM}^{(m)*}(\mathbf{k}\mathbf{r}_n)} = \frac{M_p}{M_\gamma}. \quad (3,8)$$

A *Sliv* vagy *Rose* táblázat konverziós koeficiensait (amelyek a dinamikus magstruktúra effektusokat nem, ill. csak közelítésben tartalmazzák) és a  $\lambda$  penetrációs paramétert felhasználva felírhatjuk a konverziós koeficiens dinamikus magstruktúra függést is tartalmazó „precíz” értékét, pl. egy mágneses  $2^L$ -pol átmenet  $K$ -konverziós koeficiensére, ha a *Sliv* táblázatból vett adatot  $\alpha_K^0(ML)$ -lel jelöljük.

$$\alpha_K(ML) = \alpha_K^0(ML) |1 - (\lambda - 1) C(Z, k, L)|^2. \quad (3,9)$$

Az  $C(z, k, L)$  súlyfüggvény kiszámítható és a dinamikus magstruktúra effektusoktól független. Nagyságrendje  $\sim 0,01$ .



Mindezek ismeretében megfelelhetünk arra a kérdésre, hogy mikor várható dinamikus magstruktúra effektusok fellépte konverziós koeficiensekben. Ha a  $\gamma$ -átmenet valamilyen tiltás miatt igen kicsi, mivel a penetrációs matrix elemre más kiválasztási szabályok érvényesek, ez utóbbi a gamma-matrix elem csökkenése ellenére is a szokásos nagyságú maradhat. Így pl. dinamikus magstruktúra effektusok fellépte várható erősen retardált M1 átmenetekben,  $l$ -tiltott M1 multipolaritásnál. Ekkor a (3,8) definíció szerint  $\lambda$  nagy értéket vehet fel. Látjuk azonban (3,9)-ből, hogy  $\lambda$  még egy 0,01 nagyságrendű faktorról van szorozva, tehát hogy a konverziós koeficiens értékében jól mérhető effektus jelentkezzen,  $\lambda$  elég nagy kell legyen.<sup>2</sup> Látható az is, hogy ha  $\lambda=1$ , akkor éppen a konverziós koeficiens Sliv-féle értékét kapjuk vissza.  $\lambda=1$  fizikailag annyit jelent, hogy mindkét matrix elem megtartotta dimenzionális értékét, tehát a magstruktúra effektusoknak semmiféle relatív előtérbenyomulása nem következett be.

A konverziós elektronokon végzett mérésekkel a mag belső tulajdonságaira, árameloszlására vonatkozó vizsgálatokat a (3,8) és (3,9) formula alapján lehet végezni. Mérjük a konverziós koeficienst egy adott héjra, vagy azok viszonyát különböző héjakra. A  $\gamma$ -matrix elemet más kísérletekből (élettartam mérés) veszünk és így az  $M_p$  penetrációs matrix elem értékét összehasonlítjuk a mag belsejére tett különböző feltevések alapján számított értékekkel. Több ilyen analízist végeztek már el (pl. [18], [29], [86]).

#### b) Elektromos multipól átmenetek

Az elektromos jellegű multipól átmenetek tárgyalásának menete hasonló a mágnesesekéhez. A közös kiindulás a (3,1) összefüggés és az ebből következő (3,2) sorbafejtés. (3,2) második szummája az, amivel itt részletesen foglalkozni kell. Több cikk foglalkozik külön is részletesen az elektromos átmenetekben jelentkező magstruktúra effektusokkal [28–30], mindenekelőtt az E1 átmenetekkel.

Az elektromos átmenetek esetében (3,3)-hoz hasonlóan elvégezhető a teljes matrix elem felbontása szeparálható főtagra és két penetrációs tagra, bár itt ez a szétválasztás nem megy olyan egyszerűen, mint a mágneses átmenetek esetében. Az egész kifejezés az elektron változókra való integrálás után

$$U_{el}(L, M) = B(e) \left[ R(e) \int_0^\infty d\tau_n \mathbf{j}_n \mathbf{A}_{LM}^{(e)*}(k\mathbf{r}_n) + \right. \\ \left. + \int_0^\infty d\tau_n \mathbf{j}_n \nabla \Phi(r_n) Y_L^{M*}(\hat{\mathbf{r}}_n) + \int_0^\infty d\tau_n \mathbf{j}_n \frac{\mathbf{r}_n}{r_n} \Theta(r_n) Y_L^{M*}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right]. \quad (3,10)$$

A  $B(e)$  a konverziós elektronok szögeloszlásra való integrálásából, az  $R(e)$ ,  $\Phi(r_n)$  és  $\Theta(r_n)$  pedig a radiális elektron változókra való integrálásból adódik. A számítások szerint, ha a gamma-matrix elemnél semmiféle tiltás nem lép fel (azaz megtartja a dimenzionális értékét), a két penetrációs tag néhány %-a a főtagnak. A penetrációs tagokban szereplő kétféle típusú ( $\mathbf{j}\nabla$  és  $\mathbf{j}\cdot\mathbf{r}$ ) matrix elemek különböző súly függvénye miatt ( $\Phi$  és  $\Theta$ ) azonban az első penetrációs tag általában mintegy

<sup>2</sup> A (3,9) egyenletnek két megoldása is lehet. Így előfordul, hogy egy kísérleti adatot egy nagy és egy kis érték is kiadhat.



két nagyságrenddel nagyobb súllyal szerepel [29]. Ez a viszony azonban a mélyebb analízis szerint teljesen megváltozhat éppen olyan esetekben, amikor a *gamma matrix* elemében érvényesülő tiltás miatt a konverziós koeficiensben a *dinamikus magstruktúra effektusoknak betudható anomáliák* jelentkeznek.

A kétféle penetrációs matrix elemnek megfelelően itt két (3,8)-hez hasonló  $\lambda$  penetrációs paraméter játszik szerepet, amelyet  $\lambda'$  és a  $\lambda''$ -vel jelölünk. Ezeknek a paraméterek a *Rose* táblázat értékeivel  $\alpha_K^0(EL)$ , és a „precíz” konverziós koeficienssekkel való összefüggésére hasonló formulát lehet megadni, mint a mágneses átmenetek esetében láttuk (3,9). A benne szereplő elektron tulajdonságaitól függő faktorokat *Green* és *Rose* számította ki és adja meg táblázatokban [24].

A konverziós koeficiens értékére kísérletileg talált anomális adatok analízisének, mint pl. a  $\text{Pa}^{231}$  84,2 keV-os átmeneténél  $L_I$  és  $L_{II}$  konverziós koeficiensére [35], kiszámíthatjuk a kétféle típusú penetrációs matrix elem kísérleti értékeit és ezt össze hasonlíthatjuk azokkal az elméleti értékekkel, amelyeket a mag belső struktúrájára vonatkozó feltevések alapján kaptunk [29].

### c) Elektromos monopól átmenetek

A  $0 \rightarrow 0$  átmenetekben (paritás változás nélkül) kizárólagos jelleggel, az  $I-I$  átmenetekben ( $I \neq 0$ ,  $\Delta\pi=0$ ) pedig hozzákeveredésképpen jelenik meg az  $E0$  monopól átmenet. Az  $E0$  különbözik a többi elektromos multipóloktól, mivel tranzverzális része nincs és így elektromos monopól  $\gamma$ -átmenet nem létezik,  $0 \rightarrow 0$  esetben  $\gamma$ -sugárzás egyáltalán nem is lép fel. Ezekkel az átmenetekkel, főleg a dinamikus magstruktúra effektusok szempontjából többen is foglalkoztak: *Church* és *Weneser* 1955 [36], *Feiner* 1957 [37], *Church*, *Rose* és *Weneser* 1958 [38], *Lisztengarten* és *Band* 1959 [39].

Két fontos tulajdonsága a monopól átmeneteknek, hogy mágneses monopól átmenet nincsen, mivel nincsen  $\Delta l=0$  tranzverzális tag (csak skaláris és longitudinális) és hogy az elektromos monopól átmenetekért teljes egészében a penetrációs matrix elemek a felelősek, tekintve, hogy a *gamma matrix* elem zérussal egyenlő,

$$U(E0) = \int_0^\infty \left[ d\tau_n \varrho_n \int_0^{r_n} d\tau_e \varrho_e \left( \frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_e} \right) \right]. \quad (3,11)$$

A monopól konverzió tehát teljes egészében dinamikus magstruktúra effektus eredménye. (3,11) azután át lehet írni olyan formába, amelyben a penetrációs mag matrix elem egy — csak az elektron változóktól függő — faktorial van szorozva [18].

$E0$  komponensek fellépte a magnívók elhelyezkedésének megfelelően több mag tartományban is várható, így pl. a  $2^+ \rightarrow 2^+$  vibrációs állapotok között [36, 18], vagy a deformált magok tartományában páros-páros magoknál az alap rotációs sávban ( $2^+ \rightarrow 2^+$  és  $0^+ \rightarrow 0^+$  átmenetek) [18]. Bár kísérleti adataink vannak az  $E0$  belső konverzióra vonatkozólag, további adatok szükségesek, főleg a magstruktúra mélyebb megismerését célzó elméleti analízisek végrehajtásához.

### d) Szögkorrelációk belső konverziónál

A dinamikus magstruktúra effektusok tanulmányozásánál a belső konverzió jelenségével kapcsolatban igen fontos szerepe van azoknak a szögkorrelációs



vizsgálatoknak, amelyekben legalább az egyik tag konverziós elektron, azaz  $e^- - e^-$ ,  $\gamma - e^-$ ,  $\beta - e^-$  szöghorrelációnál.

A konverziós elektront is magába foglaló szöghorreláció formalizmusa egy faktorban, az ún. *részecske paraméterben* különbözik a  $\gamma - \gamma$  szöghorreláció valószínűségének kifejezésétől [21], éspedig így

$$W(\theta, e, \gamma) = \sum_v A_v(e, \gamma) P_v(\cos \theta), \quad (3,12)$$

$$A_v(e, \gamma) = \underbrace{b_v F_v(e)}_{A_v(e)} \cdot \underbrace{F_v(\gamma)}_{A_v(\gamma)} \quad (3,13)$$

Itt  $b_v$  az ún. részecske paraméter. Kevert átmenetek esetén a (3,13) kifejezés bonyolultabb és pl. egy  $ML$  és  $E(L+1)$  multipolaritású átmenet konverziós elektronjai és egy tiszta multipolaritású  $\gamma$ -átmenet  $\gamma$ -kvantumai közti szöghorrelációnál

$$A_v(e) = b_v(ML) F_v(LLj_0j_1) + p^2 b_v[E(L+1)] F_v(L+1, L+1, j_0j_1) + 2pb_v[ML, E(L+1)] F_v(L, L+1, j_0j_1), \quad (3,14)$$

$$p^2 = \frac{NE(L+1)}{N(ML)} = \left[ \frac{\alpha(L)}{\beta(L+1)} \right] \delta^2 \quad (3,15)$$

Az  $F_v$  függvények a táblázatokban meglátható szöghorrelációs függvények az ún. geometriai függvények,  $\delta$  a keveredési koeficiens, a  $b_v - k$  pedig az ún. részecske paraméterek.

A (3,15) kifejezéséből azonnal látható, hogy  $p$  függvénye a konverziós koeficienseknek és azokon keresztül nyilvánvalóan a dinamikus magstruktúra effektusoknak is. Ugyanez mondható el a részecske paraméterekről is. Így végeredményben ezek a szöghorrelációs paraméterek függvényei a  $\lambda$  penetrációs paraméternek [21] és így a konverziós elektront magába foglaló szöghorrelációs mérésekkel információkat kaphatunk a penetrációs matrix elemekről, tehát végső soron a mag belső struktúrájáról.

Legújabbban kiderült (Geiger and Brown, 1963 [41], Church, Schwarzschild és Wenner 1964 [42]), hogy Biedenharn és Rose eredeti cikkében [40] a részecske paraméterek egyikének, az *interferencia részecske paraméternek*,  $b_v [ML, E(L+1)]$  előjele nem helyesen volt megadva. Maga Biedenharn és Rose is újra és teljesen általánosan megvizsgálta ezt a kérdést és egyetértett Geiger, illetve Church és munkatársaival [43]. Ez a tény több korábbi kísérlet új kiértékelését tette szükségessé.

#### 4. Kísérleti eredmények

Az elmúlt másfél évtizedben nemcsak igen nagy számú adat gyűlt össze a konverziós elektronokra vonatkozólag, de igen nagy fejlődésen ment keresztül mind a konverziós koeficiens meghatározásának, mind a konverziós elektronok szöghorrelációs vizsgálatának technikája is.

Míg egy évtizeddel ezelőtt a konverziós koeficiens meghatározásánál a 10%-os, sőt ennél jóval nagyobb pontatlanságú adatok voltak az általánosak (sőt még ma is vannak ilyen mérések, amelyek átmenetek multipolaritásának meg-



határozására teljesen alkalmasak, pl. [44]), ugyanakkor ma már a pontosabb mérésnél az 5%-os pontosság a szokásos és bizonyos speciális esetekben pedig ezt is sikerült felülmúlni, sőt az 1% körüli pontosságot is elérni a konverziós koeficiensek mérésénél [45–49, 56]. Legújabban  $e^- - \gamma$  szögkorreláció mérésénél is sikerült elérni az 5%-os pontosságot a részecske paraméterek meghatározásában [50].

A felgyűlt mérési anyagot durván két nagy csoportra lehet osztani. Az egyik csoportba azok a mérések sorolhatók, amelyek a belső konverzió jelenlegi elméletének<sup>3</sup> igazolására törekedtek. Itt olyan  $E2$ , elsősorban  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenetekben mérték a konverziós koeficienseket, azok viszonyát, illetőleg a konverziós elektronokat is magába foglaló szögkorrelációt, amelyekben a jelenlegi elmélet szerint [18] semmiféle dinamikus magstruktúra effektus nem várható, tehát a konverziós koeficiensek esetében a *Rose*, ill. a *Sliv* és *Band* táblázat értékeivel teljes egyezés várható, a szögkorrelációnál pedig a részecske paraméter magstruktúra effektusok figyelembevétele nélkül számítható. Az ilyen típusú átmenetek ugyanakkor kísérleti szempontból is igen alkalmasak, mivel itt semmiféle más multipolaritás hozzákeveredése nem várható (ezért „tisztá”  $E2$  átmenetek).

A kísérleti anyag másik része mind a konverziós koeficiensek vizsgálatával, mind megfelelő szögkorrelációs mérésekkel dinamikus magstruktúra effektusok utáni kutatásokról számol be, elsősorban ott, ahol az elméleti előrejelzés szerint ilyen effektusok fellépte várható (erősen retardált  $M1$ ,  $E1$  átmenetek,  $E0$  átmenetek). Egy néhány esetben ilyen adatok alapján elvégezték a részletes analízist is magstruktúrára vonatkozólag.

A továbbiakban a fenti csoportosításban tekintjük át a kísérleti anyagot.

#### a) Vizsgálatok az $E2$ átmenetekre vonatkozólag

Mint ismeretes az előzőekből, a gyors  $E2$  átmeneteknél a belső konverzió magstruktúra effektusokat is figyelembevevő jelenlegi elmélete szerint sem várható magstruktúra effektusok jelentkezése. Ugyanakkor, mint már szintén említettük, kísérleti oldalról az  $E2(2^+ \rightarrow 0^+)$  átmenetek a legalkalmasabbak az elmélet próbájául, mivel ezek tiszta  $E2$  multipolaritásúak semmiféle hozzákeveredés sem torzítja el az eredményt.

Ennek ellenére még 1957-ben *McGowan* és *Stelson* [51] több rotációs állapotok között végbemenő  $E2$  átmenetre, köztük  $2^+ \rightarrow 0^+$  típusúakra is 20% körüli eltérést talált a  $K$  konverziós koeficiens értékénél a *Sliv*-féle táblázat értékeitől. Ezek és más kísérleti adatok alapján *Berstein* [52] egy törvényszerűséget vélt felfedezni a deformált magok tartományában. E szerint a teljes konverziós koeficiens eltérése  $E2$  átmeneteknél a *Sliv*–*Rose* szerinti elméletitől az  $N/Z$  hányados csökkenésével nőne. Később határozottan cáfolták ilyen törvényszerűség létezését (*Lu* és *Dignus* 1962 [53], *Thosar et al.* 1963 [54]), viszont *Fossan* és *Herskind* 1963-ban élettartam-mérésekből számított konverziós koeficiensekre határozottan állítják az eltérések jelenlétét [55] a deformált tartományban.

<sup>3</sup> A belső konverzió jelenlegi elméletén értjük ahogy azt a 3.-ban kifejtettük, tehát a belső konverzió magstruktúra effektusokat is magába foglaló teljes elméletét. Eszerint a belső konverziós kölcsönhatás legnagyobb valószínűséggel a magon kívüli térben folyik le és csak bizonyos speciális esetekben kapnak jelentőséget a dinamikus magstruktúra effektusok. Ugyanakkor az ún. statikus magstruktúra effektusokat, továbbá az elektronburok árnyékoló hatását általában figyelembe kell venni.



Az elmúlt néhány évben több csoport (főleg Svédországban, Hollandiában és az Egyesült Államokban) folytatott igen intenzív kutatásokat annak kiderítésére, hogy a tiszta  $E2$  átmenetekben van-e vagy nincs eltérés a *Sliv—Rose* táblázat értékeitől, mivel ez a kérdés a belső konverzió egész jelenlegi elméleti felfogásának helyessége szempontjából döntő jelentőségű.

Így pl. a  $\text{Hg}^{198}$  412 keV-os  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenetére a  $K$  konverziós koeficiens értékét legújabban a stockholmi Nobel Intézetben és a delfti (Hollandia) egyetemi intézetben is megmérték különböző módszerekkel és közel 1% pontossággal [56—58]. A  $302 \cdot 10^{-4}$  elméleti értékkel nagyon jól egyező  $303,5 \pm 4,5$ ;  $298,5 \pm 4,5$  és  $303 \pm 5$  értékeket kapták. Érdemes itt megemlíteni, hogy 1962-ben még hibahatáron kívüli eltérést találtak, a kísérleti adat 5%-kal alacsonyabb volt az elméleti értéknél (*Frey et al.* [59]).

A további mérések a tiszta  $E2$  konverziós koeficiensekre vonatkozóan (*Hultberg et al.* 1961 [60], *Bashandy és El-Nesr* 1962 [61], *Newbolt et al.* 1963 [62]) általában jó egyezésben vannak az elmélettel. Viszont *Jansen et al.* [63], akik a  $\text{Hg}^{200}$  és  $\text{Pt}^{196}$ -nál szintén az elmélettel egyezést kaptak, az  $\text{Y}^{170}$  deformált magnál  $15 \pm 10\%$ -os eltérést mutattak ki (1962). Ugyanők 1963-ban a varsói konferencián [64] több más deformált mag esetében is ( $\text{Sn}^{152}$ ,  $\text{Gd}^{154}$ ,  $\text{Dy}^{160}$ ) találtak eltérést, bár hangsúlyozták, hogy bizonyos korrekciókat még nem hajtottak végre, de ezek értéke nem valószínű, hogy teljesen magyarázza az eltérést.

Konverziós elektron- $\gamma$  szögkorrelációkat is megvizsgáltak tiszta  $E2$  átmenetekre, hogy van-e eltérés az elmélettől. A  $\text{Sm}^{152}$  esetében ( $245 \rightarrow 122$ ;  $4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$  kaszkád) az elméleti részecske paraméterrel jó egyezést találtak [65], míg az  $\text{Y}^{170}$ -nél (84 keV-os átmenet) kisebb eltérés adódik a hibahatáron kívül, de az elmélettel való egyezés itt se zárható ki [66].

Összefoglalva legújabban csak négy közlemény (*Jansen et al.* 1962 [63], *Hamilton et al.* 1962 [67], *Fossan és Herskind* 1963 [55], és *Jansen et al.* 1963 [64]), jelent meg, amelyek tiszta  $E2$  átmenetekben kisebb, legfeljebb 10% körüli eltérést találtak az elméleti értéktől a nehéz magok tartományában (főleg a deformált magoknál). De itt is inkább egyes magokról van szó, a *Berstein*-féle szabályszerűség határozottan megcáfoltnak tekinthető. Ezen túlmenően pl. *Jansen et al.* legutóbbi cikkükben bár találtak eltérést, de mint említettük, a fotoelektronok szórására a korrekciókat még nem végezték el. Határozottan megfigyelhető továbbá a tendencia, hogy azokban az esetekben, ahol régebben eltéréseket találtak, az újabb, pontosabb mérések kimutatják az elmélettel való egyezést (pl.  $\text{Hg}^{198}$ ).

Mindezek alapján jelenleg nem látszik komoly ok arra, hogy a jelenlegi elmélet és ezzel együtt a *Sliv—Rose* táblázatok érvényességét általában kétségbevonjuk. Mindenesetre további pontos mérések tiszta  $E2$  átmenetekre hasznosak lennének.

#### b) A belső konverziónál jelentkező dinamikus magstruktúra kutatás kísérleti eredményei

Mint láttuk (lásd 3.) dinamikus magstruktúra effektusok jelentkezése (mind a konverziós koeficiensek, mind a konverziós elektron szögkorrelációk mérésénél) olyan átmenetekben várható, ahol a  $\gamma$ -matrix elem valamilyen tiltás miatt igen kicsivé vagy zérussá válik, ugyanakkor azonban a dinamikus magstruktúra effektusok következtében fellépő penetrációs matrix elemekre nem hat az előbbi tiltás, hanem megtartják dimenzionális, azaz normális értéküket.



Eddig főleg három átmenet típusnál találtak konverziós „anomáliákat” a fenti elvi alapon: retardált  $M1$  és  $E1$ , továbbá  $E0$  átmenetek és ezeket analizálták részletesen elméletileg is.

A)  $M1$  átmenetek. Már Church és Wenner legelső, a belső konverziónál dinamikus magstruktúra effektusok jelenlétét felvető cikkükben [13] rámutattak, hogy három különböző típusú retardált  $M1$  átmenetnél is várható anomáliák fellelése: 1. átmenet ugyanazon multiplett állapotai között (páratlan A-jú deformált magok rotációs sávjában); 2.  $I$ -tiltott átmenetek (főleg gömbszerű magoknál); 3. páros-

# I. TÁBLÁZAT

*M1 multipolaritású átmenetekben észlelt konverziós anomáliák*

Mag	Energia	Átmenet	Észlelt anomália	Hivatkozás	Típus
$\rightarrow \text{Ho}^{165}$	94 keV	$9/2^- \rightarrow 7/2^-$	1. $L_{1/L_2}$ , $L_{1/L_3}$ , $L_{2/L_3}$ -nál a hibahatáron kívül más $E2$ hozzákeveredés adódik	Novakov és Stepic [68]	1
$\text{Lu}^{175}$	114	$9/2^+ \rightarrow 7/2^+$	1. „ 2. $\gamma-e^-$ szögkor. normális	„ Thun [69]	1
$\text{Cs}^{133}$	81	$5/2^+ \rightarrow 7/2^+$	1.* $L_{1/L_2}$ , $L_{1/L_3}$ , $L_{2/L_3}$ -nál a hibahatáron kívül más $E2$ hozzákeveredés adódik 2. $\alpha_K$ kísérleti értéke $\sim 10\%$ -kal nagyobb	Brown [70] Ramaswamy [71]	2 2
$\text{T}^{203}$	279	$3/2^+ \rightarrow 1/2^+$	1.* $L_{1/L_2}$ , $L_{1/L_3}$ , $L_{2/L_3}$ -nál a hibahatáron kívül más $E2$ hozzákeveredés adódik 2. $\alpha_K$ elméleti értéke $25\%$ -kal magasabb a kísérletinél 3. $\gamma-e^-$ szögkorrelációban eltérés a normálístól 4. $L_I$ és $L_{II}$ alacsonyabbak az elméletinél	Nordling [11] Croft [72] Gerholm [73] Nijgh és Wapstra [74]	2
$\text{Tl}^{201}$	330	$3/2^+ \rightarrow 1/2^+$	1. $\gamma-e^-$ szögkor. eltér a normálístól	Pettersen [75]	2
$\rightarrow \text{Ta}^{181}$	480	$5/2^+ \rightarrow 7/2^+$	1. $\alpha_K$ kísérleti értéke nagyobb az elméletinél $\gamma-e^-$ szögkor. eltér a normálístól	Snyder [34]	2
$\text{Pt}^{196}$	333	$2^+ \rightarrow 2^+$	1. $\gamma-e^-$ szögkor. eltér a normálístól	Gerholm [76]	3

A „ $\rightarrow$ ” jellel jelölteknel a leghatározottabban megállapított az anomália.

\* Novakov analízise.



páros magok vibrációs spektrumában a  $2^+ \rightarrow 2^+$  átmenetekben. A felsorolt mindhárom típusban kísérletileg is kimutatták már a dinamikus magstruktúra effektusok jelenlétét (I. Táblázat). A táblázatban az itt felsorolt típusok külön meg vannak jelölve.

Több más mag esetében kutattak még  $M1$  típusú átmeneteknél dinamikus magstruktúra effektus jelenléte után, de ezek a vizsgálatok nem vezettek pozitív eredményre (II. Táblázat). A táblázatok általában az újabb eredményeket tartalmazzák, a korábbi eredményekre vonatkozólag [32]-re utalunk.

## II. TÁBLÁZAT

*M1 átmenetek, ahol a konverziós anomáliák utáni kutatás negatív eredményre vezetett*

Mag	Mérés	Hivatkozás
$I^{125}$	$e^-$ szögkor.	Geiger és Brown [41]
$I^{127}$	„	Geiger és Brown 41
$Re^{187}$	konv. koeff. viszonyok az $L$ -héjakon	Novakov és Stepic' [68]
$Tm^{169}$	1. $e^-$ szögkor.	Grabowski [77]
	2. konverziós koeff.	Grabowski [78]
$Hg^{199}$	konv. koefficiensek	Hahn [44]

B) *Retardált  $E1$  átmenetek.* A dinamikus magstruktúra effektusok szempontjából talán ezen típusú átmeneteket analizálták elméletileg a legrészletesebben [28–30]. Ezek szerint anomáliák jelentkezése a nehéz magok  $E1$  átmeneteinél a legvalószínűbb. Azért a nehéz magoknál, mert itt nő a magméret (tehát a magon belüli konverziós kölcsönhatás valószínűsége) és azért az  $E1$  átmeneteknél, mivel itt nagy a retardálási faktor ( $10^{-4}$ – $10^{-6}$  sőt nagyobb) [79, 80] a  $\gamma$ -átmenetre, ugyanakkor, amikor a penetrációs matrix elem megtartja dimenzionális értékét.

Azt lehet mondani, hogy a legmegbízhatóbb bizonyítékok a dinamikus magstruktúra effektus jelentkezésére ezek közül az átmenetek közül kerülnek ki. Főleg az  $L_I$  és  $L_{II}$  konverziós koefficienseknél észleltek eltéréseket, míg ugyanezekben az esetekben az  $L_{III}$  normális. (Itt általában olyan alacsony energiájú átmenetekről van szó, hogy a  $K$  héj kötési energiája alatt vagyunk, vagy annak közvetlen határán.) Asaro et al. már 1960-ban összegyűjtött egy sor kísérleti bizonyítékot [35]. A  $Pa^{231}$  84,2 keV-os átmenetnél az  $L_I$  21-szer, az  $L_{II}$  15-ször nagyobb az elméleti értéknél. Asaro et al. közleményéből vettük át a III. Táblázatunkat. A táblázatban szerepel a konverziós anomália faktor. Ez definíció szerint

$$f_A = \frac{\sum_{i=1}^3 |\alpha(L_i)_{\text{kis}} - \alpha(L_i)_{\text{elm}}|}{\sum_{i=1}^3 \alpha(L_i)_{\text{elm}}}$$

(Lásd III. Táblázat).



III. TÁB-  
L-alhøj konverziós koeficiensek

Mag	Átmeneti energia (keV)	Kísérleti konverziós koeficiensek			
		$\alpha(L_I)$	$\alpha(L_{II})$	$\alpha(L_{III})$	$\alpha(T)$
Np <sup>237</sup>	59,6	$0,22 \pm 0,02$	$0,46 \pm 0,05$	$0,12 \pm 0,03$	$1,0 \pm 0,03$
Np <sup>237</sup>	26,4	2,0	3,9	1,2	$10 \pm 2$
Np <sup>239</sup>	74,6	$0,08 \pm 0,02$	$0,06 \pm 0,02$	$0,06 \pm 0,02$	0,31
Am <sup>243</sup>	83,9	$0,047 \pm 0,011$	$0,057 \pm 0,013$	$0,041 \pm 0,009$	$0,20 \pm 0,04$
Pu <sup>239</sup>	106,1	$0,062 \pm 0,007$	$0,071 \pm 0,007$	...	...
Pu <sup>239</sup>	61,4	0,4	...	...	...
Pa <sup>231</sup>	84,2	$1,3 \pm 0,2$	$0,65 \pm 0,15$	$0,046 \pm 0,014$	$2,8 \pm 0,4$
Pa <sup>231</sup>	25,7	...	...	...	$4,8 \pm 1,0$
Pa <sup>233</sup>	86,3	$0,35 \pm 0,15$	$0,57 \pm 0,26$	$0,08 \pm 0,08$	$1,9 \pm 0,7$
Pa <sup>233</sup>	29,3	...	...	...	$3,0 \pm 0,8$
Ra <sup>223</sup>	50,0	...	...	...	$0,7 \pm 0,2$
Ac <sup>227</sup>	27,5	...	...	...	(L) $2,8 \pm 0,3$
Ac <sup>225</sup>	40,0	$0,23 \pm 0,07$	$0,26 \pm 0,09$	$0,41 \pm 0,13$	...

Az újabb vizsgálatok csak megerősítették ezeket a korábbi eredményeket (pl. *Valentin és Santoni* [81], *Herrlander és Ewan* [82]). Közzöljük *Herrlander és Ewan* táblázatát (IV. Táblázat) és ábráját (2. ábra), amelyeket a varsói konferencián (1963) adtak közre.

Az eddigi eredmények alapján a következő törvényszerűségeket lehet megállapítani [82]:

1. 10%-nál nagyobb anomáliát a konverziós koeficienseknél csak akkor lehet megfigyelni, ha az átmenetre az akadályoztatási faktor nagyobb, mint  $10^5$ .

2. A K tiltás nem okoz anomáliát.

3. A konverziós anomália faktor és a  $\gamma$ -retardálás között van kapcsolat, de ez nem egyszerű arányosság.

Végül megjegyezzük, hogy retardált E1 átmeneteken végeztek konverziós elektron szöghkorrelációs méréseket is [69, 83]. Ezek a Lu<sup>175</sup> 282 keV-os átmeneténél vezettek pozitív eredményre, míg a Hf<sup>177</sup> 208 keV-átmeneténél anomáliát nem sikerült kimutatni.

c) E0 átmenetek

Az elméleti előrejelzés szerint dinamikus magstruktúra effektusok várhatók a paritás változás nélküli  $0 \rightarrow 0$  átmenetekben, továbbá az  $I \rightarrow I$  átmenetekben is ( $I \neq 0, \Delta\pi = 0$ ), főleg a gömbszerű magok  $2^+ \rightarrow 2^+$  vibrációs átmeneteiben.

Konverziós elektronokon végzett szöghkorrelációs mérések (Pt<sup>196</sup>, *Gerholm és Petterson*, 1958 [76]) elég korán szolgáltatott kísérleti bizonyítékot is erre az elméleti előrejelzésre. Később ezeket a vizsgálatokat megismételték és a konverziós koeficiensekre vonatkozó mérésekkel egészítették ki [84]. Újabban *Yamazaki* végzett hasonló méréseket Os izotópokon [85]. Legújabban a Vanderbilt Egyetemen rendezett nemzetközi konferencián (1965. május) újabb eredményekről számoltak be, amelyek megerősítik az E0 hozzákeveredés jelenlétét M1 – E2 multipolaritású átmenetekben [87].



## LÁZAT

E1 átmenetekben [35]

Elméleti konverziós koeficiensek (Sliv és Band/Rose)			Konverziós anomália faktor	Foton retardálási faktor
$\alpha(L_I)$	$\alpha(L_{II})$	$\alpha(L_{III})$		
0,13/0,11	0,12/0,10	0,13/0,13	$1,1 \pm 0,2$	$3,1 \times 10^5$
0,55/0,22	1,1/0,55	1,4/1,3	$1,3 \pm 0,5$	$3,8 \times 10^5$
0,084/0,072	0,066/0,055	0,063/0,061	$0,04^{+0,15}_{-0,04}$	$5 \times 10^3$
0,068/0,054	0,052/0,042	0,046/0,045	$0,17 \pm 0,10$	$1,3 \times 10^4$
0,041/0,035	0,026/0,021	0,021/0,021	$0,75 \pm 0,11$	$2,4 \times 10^6$
0,13/0,10	...	...	...	...
0,064/0,055	0,042/0,037	0,039/0,039	$12,8 \pm 2,1$	$2,8 \times 10^6$
...	...	...	$0,18 \pm 0,07$	$4,5 \times 10^4$
0,060/0,052	0,039/0,034	0,036/0,036	$6,4 \pm 3,0$	$1,4 \times 10^6$
...	...	...	$0,076^{+0,18}_{-0,076}$	$7,2 \times 10^4$
...	...	...	$0,045^{+0,09}_{-0,045}$	$1,1 \times 10^3$
0,55/0,28	1,2/0,53	0,84/1,1	$0,24 \pm 0,11$	$3,3 \times 10^4$
0,29/0,21	0,32/0,25	0,40/0,37	$0,13 \pm 0,08$	$4,7 \times 10^3$

## 5. Legújabb eredmények, következtetések

Mint az előző pontban láttuk a belső konverzió legújabb elmélete, amelyik figyelembe veszi mind a sztatikus, mind a dinamikus magstruktúra effektusokat, nagyjából igazoltnak tekinthető. Igazolódott ugyanis, hogy a gyors E2 átmenetekben általában nincs eltérés az elméleti várakozások és a belső konverzióra vonatkozó kísérleti értékek között. (Lásd 4. a. pontot.) Kétségtelen azonban, hogy van egy néhány problematikus átmenet, mint pl. a 84 keV-os  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenet az  $\text{Yb}^{170}$ -ben ( $\alpha_K$  kb. 15%-kal magasabb az elméleti értéknél), vagy egyes átmenetek a  $\text{Gd}^{154}$ ,

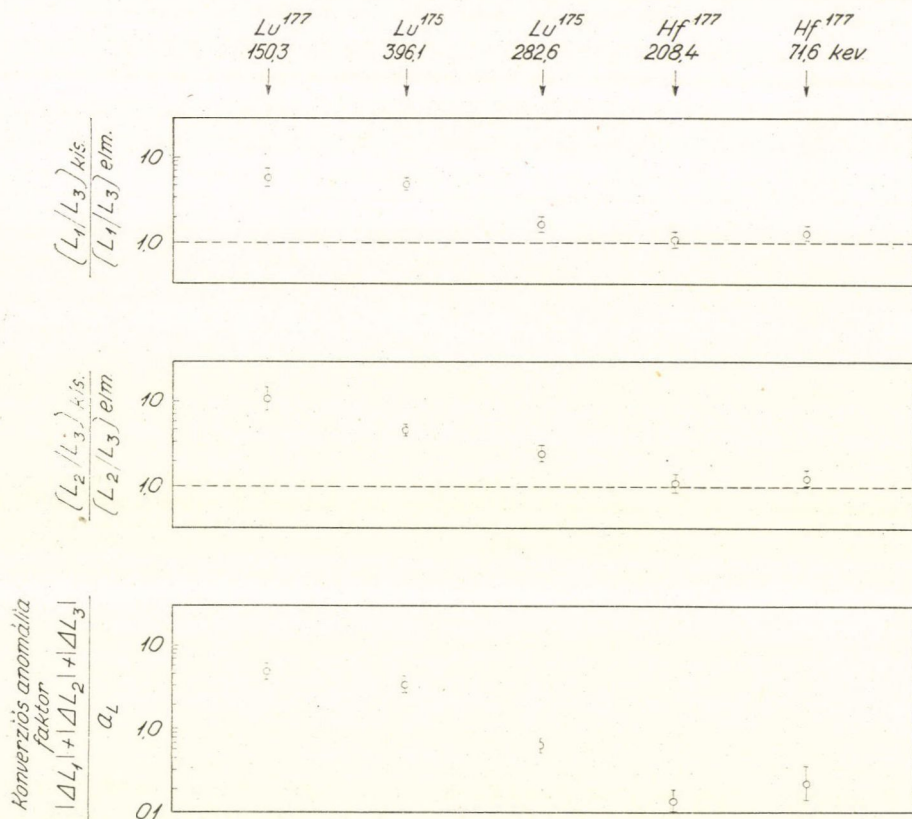
## IV. TÁBLÁZAT

Konverziós koeficiensek viszonya az L-alhéljakra retardált E1 átmenetekben [82]

Mag	E (keV)	$ M^2 $ Weiskoff egys-ben	$L_1/L_3$		$L_2/L_3$	
Tm <sup>171</sup>	296,0	$1 \times 10^{-9}$	$8,0 \pm 0,9$	(7,7)	$1,08 \pm 0,10$	(1,1)
Tm <sup>171</sup>	308,6	$2 \times 10^{-9}$	$8,2 \pm 0,8$	(7,7)	$1,19 \pm 0,10$	(1,1)
Lu <sup>177</sup>	150,3	$4 \times 10^{-7}$	$27 \pm 7$	(4,4)	$10 \pm 3$	(0,93)
Lu <sup>175</sup>	396,1	$6 \times 10^{-7}$	$50 \pm 5$	(9,9)	$5,7 \pm 0,6$	(1,1)
Lu <sup>175</sup>	282,6	$1 \times 10^{-6}$	$12,6 \pm 1$	(7,6)	$2,6 \pm 0,4$	(1,1)
Hf <sup>177</sup>	71,6	$7 \times 10^{-6}$	$3,1 \pm 0,5$	(2,2)	$1,2 \pm 0,3$	(0,84)
Gd <sup>159</sup>	364,1	$2 \times 10^{-5}$	$7,2^{+4,4}_{-2,0}$	(8,6)	1	(1,1)
Hf <sup>177</sup>	208,4	$3 \times 10^{-5}$	$6,5 \pm 0,6$	(5,8)	$1,05 \pm 0,1$	(0,98)
Dy <sup>161</sup>	74,6	$3 \times 10^{-5}$	$2,72 \pm 0,15$	(2,4)	$0,79 \pm 0,07$	(0,85)
Gd <sup>155</sup>	105,6	$2 \times 10^{-4}$	$3,9 \pm 0,3$	(4,0)	$0,80 \pm 0,10$	(0,90)

Dy<sup>160</sup>-ban és így további mérések ebben az irányban egyáltalán nem mondhatók feleslegesnek.

Mind a sztatikus, mind a dinamikus magstruktúra effektusok jelenléte is beigazoltak tekinthető belső konverzióknál. Az elmélet szerint dinamikus magstruktúra effektusok, „anomáliák” jelenléte azoknál az átmeneteknél várható, ahol a  $\gamma$ -átmenet tiltott, de a penetrációs matrix elemekre nem hat ugyanez a tiltás. Röviden tehát azt lehet mondani, hogy dinamikus magstruktúra effektusokat elsősorban a nehezebb magok (ezeknél nagyobb a magméret) olyan retardált (a Weisskopf



2. ábra. Az elméleti és kísérleti érték összehasonlítása az  $L$ -alhéj konverziós koefficiensek viszonyára deformált magok erősen retardált  $E1$  átmenetében

becslés szerinti élettartamnál lényegesen hosszabb nivó élettartamú) átmeneteinél kell keresnünk, amelyeknél a tiltás csak a  $\gamma$ -matrix elemre hat, de nem érvényes a penetrációs matrix elemekre. Ilyen esetek pedig az elmélet szerint bizonyos típusú  $M1$  és  $E1$  átmenetek, valamint az  $E0$  átmenetek, ill. hozzákeveredések. Ezekre az esetekre az elméleti számításokat is elvégezték részletesen.



A magstruktúra effektusok jelenlétére a leghatározottabb bizonyítékot a nehezebb magok kis energiájú lassú  $E1$  átmenetei szolgáltatják. Itt egyes kirívó esetekben a *Sliv—Rose*-féle elméleti  $L_1$  és  $L_{II}$  konverziós koeficiens értékektől 10, sőt 20-szorosan magasabb értékek is előfordulnak.

Az  $M1$  átmenetek különböző retardált típusú átmeneteinél (lásd a 3. c. pontot és az I. Táblázatot) kétségkívül észleltek a dinamikus magstruktúra effektusokra mutató anomáliákat ( $\text{Ho}^{165}$ ,  $\text{Ta}^{181}$ ). Az ilyen effektusok kimutatására itt számos konverziós elektronokat befoglaló szögkorrelációs mérés is történt. Ezek értékét, pontosabban bizonyító erejét azonban nagymértékben csökkentették az interferencia részecske paraméter előjelének téves voltát bebizonyító kísérleti [41] és elméleti eredmények [42, 43]. Ezek az említett szögkorrelációs mérések újraértékelését tették szükségessé és pl. a  $\text{Ti}^{203}$  és  $\text{Ti}^{201}$  esetében arra az eredményekre vezettek [42], hogy a kísérleti eredmények összeegyeztethetők 1 körüli  $\lambda$  értékkel is, ami kis penetrációs effektusokat mutat (a  $\text{Ta}^{181}$  esetében nem egészen ez a helyzet).

Megemlítjük itt, hogy legújabban (*Novakov és Hollander*, 1964 [49])  $L$ -konverziós együtthatók viszonyát mérte (1–2% pontossággal) olyan  $M1/E2$  átmenetekre, amelyek se nem nagyon gyorsak, se nem nagyon lassúk. Több esetben határozottan pozitív effektust találtak.<sup>4</sup>

A további mérések és nyílt problémák szempontjából értékelve az egész problémakört, a következőket mondhatjuk. Magának a jelenségnek a szempontjából úgy látszik, hogy a jelenlegi *Sliv—Rose—Church—Weneser*-elmélet nagyjából helyesen írja le a belső konverzió jelenségét, azonban a kérdés mégsem tekinthető még teljesen lezártnak. Kisebb tisztázatlanságok vannak még azokban az esetekben is, ahol a jelenlegi elmélet szerint eltérés a *Rose—Sliv* táblázat értékeitől nem várható és kísérletileg is a legmegbízhatóbban lehet mérni (gyors  $E2$  átmenetek néhány magnál). Még inkább ez a helyzet a magstruktúra effektusok kimutatásával kapcsolatban. Ahol, ha bizonyítékaink vannak is az elmélet szerint megjósolt esetekben, ezek sokszor igen gyérek (pl. anomáliák rotációs nívók közötti  $M1$  átmeneteknél).  $L$  konverziós elektronokkal még csak egy esetben (*Deutch és Hornshøj*, 1964 [50]) mértek szögkorrelációt, de ezt is egy olyan esetre ( $E3$ ), ahol még megfelelő számítások híján, nincs lehetőség az elmélettel való összehasonlításra.

Ha a magstruktúra szempontjából nézzük az eredményeket és a lehetőségeket, az észlelt anomáliák jól kihasználhatók a mag belső struktúrájának, pontosabban a mag töltések és áramok eloszlásának megismerésére, és ezzel együtt a különböző modellek ellenőrzésére. Ez utóbbiak alapján ugyanis kiszámíthatók a penetrációs matrix elemek, vagy a penetrációs paraméter elméleti értékei, amelyek összehasonlíthatók azután a kísérleti adatokkal. Több esetben történt már ilyen elméleti analízis (pl. *Church és Weneser*, 1960 [18], *Church és Weneser*, 1961 [29], *Kramer és Nilsson*, 1962 [30] és *Lombard*, 1964 [86]).

A belső konverziós jelenségek ez utóbbi említett felhasználása kapcsolódik a magstruktúra felderítését célzó nagy energiájú rugalmatlan energiaszórási kísérletekhez (*Hofstadter*, [22]). A penetrációs matrix elemek ugyanis hasonlóak azokhoz az átmeneti matrix elemekhez, amelyek a szóban forgó szórási jelenségeket leírják, ahol ténylegesen a magba való elektron penetráció lép fel. Így fizikailag érthető,

<sup>4</sup> A már említett konferencián (*Vanderbilt Egyetem*, 1965. május) kiderült, hogy az elméleti számítások pontatlansága okozza az észlelt eltéréseket [88].



hogy megfelelő esetekben hasonló információkat szerezhethünk, a belső konverziós és a nagy energiájú elektronszórási kísérletek segítségével. Valójában ezek az adatok kölcsönösen kiegészítik egymást és alapot szolgáltatnak a mag belsejének mélyebb megismerésére (pl.  $Ta^{181}$  mag esetében).

## IRODALOM

- [1] *E. Rutherford, J. Chadwick and C. D. Ellis*, Radiations from Radioactive Substances, Cambridge University Press, Cambridge, 1951. p. 341–347.
- [2] *R. D. Evans*, The Atomic Nucleus McGraw-Hill Book Co., Inc., New York—Toronto—London, 1955. p. 218–220.
- [3] *M. E. Rose, G. H. Goertzel, B. I. Spinrad, J. Harr and P. Strong*, Phys. Rev., 76, 1883, 1949.
- [4] *M. E. Rose, G. Goertzel and C. L. Perry*, ORNL-1023. Oak Ridge, 1951. Idézve Гамма-лучи (от. редактор Л. А. Слив), Изд. АН СССР, Москва—Ленинград, 1961. Гл. 4.
- [5] *M. E. Rose, G. H. Goertzel, B. I. Spinrad, J. Harr and P. Strong*, Phys. Rev., 83, 79, 1951.
- [6] *M. E. Rose*, in the book „Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy Edited by K. Siegbahn, North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1955.
- [7] *Л. А. Слив*, ЖЭТФ 21, 770, (1951).
- [8] *Л. А. Слив и М. А. Листенгартен*, ЖЭТФ 22, 29, (1952).
- [9] *N. Feather*, in the book „Beta and Gamma-Ray Spectroscopy” edited by K. Siegbahn, North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1955. pp. 745–746.
- [10] *A. H. Wapstra and G. J. Nijgh*, Nuclear Phys., 1, 245, 1956.
- [11] *C. Nordling, K. Siegbahn, E. Sokolowski and A. H. Wapstra*, Nuclear Phys., 1, 326, 1956.
- [12] *E. L. Church and J. Weneser*, Phys. Rev., 103, 1035, 1956.
- [13] *E. L. Church and J. Weneser*, Phys. Rev., 104, 1382, 1956.
- [14] *Л. А. Слив и И. М. Банд*, Таблицы коэффициентов внутренней конверсии гамма-излучения, Ч. I. К-оболочка. Изд. АН СССР, М.-Л. 1956. Idézve Гаммалучи (от. редактор Л. А. Слив), изд. АН СССР, М.-Л. гл. 4.
- [15] *Л. А. Слив и И. М. Банд*, Таблицы коэффициентов внутренней конверсии гамма-излучения, Ч. II. L-оболочка. Изд. АН СССР, М.-Л. 1958.
- [16] *M. E. Rose*, Internal Conversion Coefficients. North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1958.
- [17] Гамма-лучи (отв. редактор Л. А. Слив). Изд. АН СССР. Москва—Ленинград, 1961.
- [18] *E. L. Church and J. Weneser*, Ann. Rev. Nuclear Sci., 10, 193, 1960.
- [19] *J. M. Hollander*, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a mag átalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [20] *M. A. Листенгартен*, Előadás a XIV. Össz-szövetségi Magspektroszkópiái Konferencián. Tbiliszi, 1964.
- [21] *T. R. Gerholm and B. G. Pettersson*, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [22] *R. Hofstadter*, Ann. Rev. Nuclear Sci., 7, 231, 1957.
- [23] *T. A. Green and M. E. Rose*, ORNL-2395. Oak Ridge, 1957.
- [24] *T. A. Green and M. E. Rose*, Phys. Rev., 110, 105, 1958.
- [25] *A. S. Reiner*, Nucl. Phys., 5, 544, 1958.
- [26] *L. S. Kisslinger*, Phys. Rev., 114, 292, 1959.
- [27] *Д. П. Гречихин*, ЖЭТФ, 40, 1185, (1961).
- [28] *S. G. Nilsson and J. O. Rasmussen*, Nucl. Phys., 5, 617, 1958.
- [29] *E. L. Church and J. Weneser*, Nucl. Phys., 28, 602, 1961.
- [30] *G. Kramer and S. G. Nilsson*, Nucl. Phys., 35, 273, 1962.
- [31] *Л. А. Борисоглебский*, ЖЭТФ, 46, 1664, (1964).
- [32] *М. А. Листенгартен*, Изв. АН СССР, 22, 759, (1958).
- [33] *E. L. Church and J. Weneser*, Bull. Am. Phys. Soc., 3, 184, 1958.
- [34] *E. S. Snyder and S. Frankel*, Phys. Rev., 106, 755, 1957.
- [35] *F. Asaro, F. S. Stephens, J. M. Hollander and I. Perlman*, Phys. Rev., 117, 492, 1960.
- [36] *E. L. Church and J. Weneser*, Phys. Rev., 100, 943, 1955.



- [37] A. S. Reiner, *Physica*, 23, 338, 1957.
- [38] E. L. Church, M. E. Rose and J. Wenner, *Phys. Rev.*, 109, 1299, 1958.
- [39] M. A. Лустенгаумен и М. Банд, *Изв. АН СССР, сер. физ.* 23 235 (1959).
- [40] L. C. Biedern and M. E. Rose, *Revs. Mod. Phys.* 25, 729, 1953.
- [41] J. S. Geiger and F. Brown, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [42] E. L. Church, A. Schwarzschild and J. Wenner, *Phys. Rev.*, 133, B35, 1964.
- [43] L. C. Biedern and M. E. Rose, *Phys. Rev.*, 134, B8, 1964.
- [44] R. L. Hahn and W. S. Lyon, *Phys. Rev.*, 130, 306, 1963.
- [45] J. G. V. Taylor, *Canadian Journ. Phys.*, 40, 383, 1962.
- [46] P. H. Blichert-Toft and P. Kugler, *Ark. för Phys.* 25, 317, 1963.
- [47] S. Hultberg and P. Erman, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [48] S. Hultberg, J. H. Hamilton and J. Sistler, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [49] T. Novakov and J. M. Hollander, UCRL-11400, Lawrence Radiation Laboratory, Berkeley (Calif.) 1964.
- [50] B. I. Deutch and P. Hornshøj, *Nucl. Phys.*, 53, 497, 1964.
- [51] F. K. McGowan and P. J. Stelson, *Phys. Rev.*, 107, 1674, 1957.
- [52] E. M. Bernstein, *Phys. Rev. Letters*, 8, 100, 1962.
- [53] D. C. Lu and R. S. Dignus, No. 1237. Ames Laboratory, Ames (Iowa, USA) 1962.
- [54] B. V. Thosar, M. C. Joshi, R. P. Sharma and K. G. Prasad, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [55] D. B. Fossan and B. Herskind, *Nucl. Phys.*, 40, 24, 1963.
- [56] K. E. Bergqvist and S. Hultberg, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [57] W. H. G. Lewin, B. van Nooijen, C. W. E. van Eijk and A. H. Wapstra, *Nucl. Phys.*, 48, 159, 1963.
- [58] W. H. G. Lewin, B. van Nooijen, C. W. E. van Eijk and A. H. Wapstra, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [59] W. F. Frey, J. H. Hamilton and S. Hultberg, *Ark. för Fys.*, 21, 383, 1962.
- [60] S. Hultberg, D. J. Horen and J. M. Hollander, *Nucl. Phys.*, 28, 471, 1961.
- [61] E. Bashandy and M. S. El-Nesr, *Nucl. Phys.*, 31, 177, 1962.
- [62] W. B. Newbolt, H. W. Boyd and J. H. Hamilton, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [63] J. F. W. Jansen, S. Hultberg, P. F. A. Goudsmit and A. H. Wapstra, *Nucl. Phys.*, 38, 121, 1962.
- [64] J. F. W. Jansen, J. H. Hamilton and E. F. Zganjar, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [65] T. M. George and J. H. Hamilton, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [66] W. L. Croft, B. G. Petterson and J. H. Hamilton, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [67] J. H. Hamilton, T. R. Duncan, H. Krouser and J. Pollard, *Nucl. Phys.*, 38, 539, 1962.
- [68] T. Novakov and R. Stepic, *Physics Letters*, 6, 82, 1962.
- [69] J. E. Thun, U. Grabowski, M. S. El-Nesr, *Nucl. Phys.*, 29, 1, 1962.
- [70] F. Brown, R. L. Graham, E. T. Ewan and J. Uhler, *Canad. J. Phys.*, 39, 779, 1961.
- [71] M. K. Ramaswamy, *Phys. Rev.*, 119, 2021, 1960.
- [72] W. L. Croft, B. G. Petterson and J. H. Hamilton, *Nucl. Phys.*, 48, 267, 1963.
- [73] T. R. Gerholm, B. G. Petterson, B. Van Nooijen and Z. Grabowski, *Nucl. Phys.*, 24, 177, 1961.
- [74] G. J. Nijgh and A. H. Wapstra, *Nucl. Phys.*, 9, 545, 1958/59.
- [75] B. G. Petterson, T. R. Gerholm, Z. Grabowski and B. van Nooijen, *Nucl. Phys.*, 54, 196, 1961.
- [76] T. R. Gerholm and B. G. Petterson, *Phys. Rev.*, 110, 1119, 1958.
- [77] Z. Grabowski J. E. Thun M. S. El-Nesr and W. D. Hamilton, *Zeits. f. Phys.* 167, 111, 1962.
- [78] Z. Grabowski J. E. Thun and B. Lindström. *Zeits. f. Phys.*, 169, 303, 1962.
- [79] D. H. Wilkinson, in the book *Nuclear Spectroscopy* (ed. F. Ajzenberg-Selove) Academic Press, New York and London, 1960. Ch. V. F.

- [80] *J. Schintlmeister und F. Stary*, Acta Phys. Austriaca, 14, 358, 1961.
- [81] *J. Valentin et A. Santoni*, Journ. de Phys., 24, 648, 1963.
- [82] *C. J. Herrlander and G. T. Ewan*, Előadás „Az atomi elektronok szerepe a magátalakulásokban” konferencián. Varsó, 1963.
- [83] *J. E. Thun, Z. Grabowski, W. D. Hamilton and M. S. El-Nesr*, Nucl. Phys., 29, 13, 1962.
- [84] *T. R. Gerholm, M. S. El-Nesr, E. Bashandy and B. G. Petterson*, Ark. f. Fys., 21, 241 1962.
- [85] *T. Yamazaki*, Nucl. Phys., 44, 353, 1963.
- [86] *R. J. Lombard*, Phys. Letters, 9, 254, 1964.
- [87] *B. G. Petterson, L. Holmberg and T. R. Gerholm*, International Conference on the Internal Conversion Process, Nashville, Vanderbilt University, May, 1965.
- [88] *T. Novakov*, International Conference on the Internal Conversion Process, Nashville, Vanderbilt University, May, 1965.



# FÉLVEZETŐ MAGSUGÁRZÁS DETEKTOROK ÉS SPEKTROMÉTEREK. I.\*

DEME SÁNDOR és CSÁKÁNY ANTAL

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOM

- I. Bevezetés
- II. Működési elv
- III. Előállítási módszerek
  - III. 1. Felületi záróréteges detektorok
  - III. 2. Diffúziós zárórétegű detektorok
  - III. 3. Litium-ion drift detektorok
- IV. Főbb tulajdonságok
  - IV. 1. Jelalak, jel nagyság
  - IV. 2. Záróréteg vastagság
  - IV. 3. Visszáram
  - IV. 4. Felbontóképesség
  - IV. 5. Jelfelfutási idő
  - IV. 6. Ablakvastagság
  - IV. 7. Háttér
  - IV. 8. Érzékenység külső behatásokra
- V. Alkalmazás
  - V. 1. Alfa-sugárzás spektrometriája
  - V. 2. Töltött részek spektrometriája magreakciók vizsgálatánál
  - V. 3. Hasadási részek vizsgálata
  - V. 4. Béta-sugárzás mérése
  - V. 5. Gamma-sugárzás mérése
  - V. 6. Neutronok mérése

Megjegyzés: A közlemény második része a félvezető detektorokhoz szükséges elektronikus berendezéseket fogja leírni.

## I. Bevezetés

Figyelemmel követve az utóbbi években a nukleáris mérés technika fejlődését, feltűnik a félvezető sugárzásdetektorok egyre fokozódó elterjedése. Ma már közelítőleg kialakultak a detektortípus alkalmazási lehetőségei. Ezek a lehetőségek nem szűkülnek le a nehéz töltött részek spektrometriájára, hanem kiterjednek a béta, gamma és neutron sugárzás spektrometriájára is.

Mi magyarázza a félvezető detektorok gyors elterjedését? Elsősorban az, hogy olyan tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek nem voltak meg együtt a korábban használt részecskedetektoroknál. Ezek: az egyszerű detektorokhoz képest nagyon jó energiafelbontóképesség és linearitás, amely rövid jelfelfutási idővel, kis geo-

\* Érkezett 1964. nov. 2.



metriai mérettel párosul. A könnyen változtatható zárórég vastagság (érzékeny réteg) lehetővé teszi a nagyobb áthatoló képességű sugárzások diszkriminációját; alkalmas kiképzésben viszont fel lehet használni a detektorokat gamma és neutron-sugárzás detektálására, sőt spektrometriájára is. További előnyt jelent, hogy egyszerű tápfeszültség forrás használható működtetésükhöz.

Alkalmazási határait főként az szabja meg, hogy maximális érzékeny felülete és érzékeny térfogata — a szcintillációs elven működő számlálókhoz viszonyítva — kicsi. Egyes esetekben azonban több detektor párhuzamos működtetésével sikerül ezt a hátrányt kiküszöbölni.

## II. Működési elv [1, 2, 3]

A félvezető detektorok működési elve alapján véve hasonló a gáztöltésű ionizációs kamráéhoz. Kis vezetőképességű anyagban elektromos teret hozunk létre. Ha egy töltött részecske behatol az anyagba, akkor a gáztöltésű ionizációs kamrában ion-elektron párokat, a félvezető detektorban elektron-lyuk párokat hoz létre. Ideális esetben az elektromos tér a különböző előjelű töltéshordozókat különválasztja és összegyűjti a kivezetéseknél, elektromos impulzust hoz létre, amelyet erősíteni és regisztrálni lehet. A töltéshordozók rekombinációját a begyűjtés ideje alatt el kell kerülni, ezért az anyagban a töltéshordozóknak nagy mozgékonyságúnak kell lenniük, az anyagban nem lehetnek csapdák, vagy rekombinációs centrumok és ezen kívül a detektoroknak átütés nélkül nagy térerősséget is el kell viselniük. A korábbi kristályszámlálók, melyek gyémántból, ZnS-ből, vagy CdS-ből készültek, nem mindenben elégítették ki a fenti követelményeket [4, 5]. A később megjelent germánium és szilícium már megfelelőeknek bizonyultak [6] és a jövőben még néhány anyag jöhet számításba (pl. gallium arzenid).

A legegyszerűbb alkalmazási mód az, hogy egy félvezető tömböt két síkpárhuzamos elektróda közé kapcsolunk és így egyenletes térerősséget hozunk létre a tömb egész térfogatában. Ezeket a típusokat térfogati vezetési számlálóknak nevezzük, mert záróréteggel nem rendelkeznek és a töltés bárhol jöjjön létre a tömbben, mindenholnan összegyűjthető.

Félvezető tömbben az egyenletes térerősség és a síkpárhuzamos geometriai feltételek könnyen biztosíthatók. A töltések gyors és lehetőleg veszteség nélküli összegyűjtéséhez azonban nagy egyenfeszültségre van szükségünk és ez megköveteli, hogy a detektoron átfolyó áramra fokozott figyelmet fordítsunk. A szokásos energiájú részecskék által keltett elektronok és lyukak kis áramot hoznak létre. Egy 5 MeV-es alfa részecske például mintegy  $1,4 \times 10^6$  párt gerjeszt. Ezeket egy 1 mm-es vastagságú érzékeny rétegből 0,1  $\mu$ sec nagyságrendű idő alatt gyűjthetjük össze, ami közelítőleg  $2 \times 10^{-6}$  amperes átlagos áramot jelent a jel időtartamára. Egy jó detektor esetében ennek az áramnak sokkal nagyobbak kell lennie, mint a detektoron átfolyó egyenáram fluktuációjából eredő zaj.

A valószínűségi számítás segítségével kimutatható, hogy az áramingadozás négyzetes középértéke

$$\overline{\Delta i^2} = 2eIdf$$

ahol  $e$  az elektron töltése,  $I$  az áram középértéke,  $df$  annak a műszernek a sávszélessége, amellyel a mérést végezzük.



Ha a  $2 \times 10^{-6}$  amperes jeláram 2 ezelékes fluktuációját engedjük meg és a mérőműszer sávszélessége 10 MHz, akkor a fenti összefüggés alapján a detektoron átfolyó egyenáram  $5 \times 10^{-6}$  amper lehet.

A fentiek alapján látható, hogy a számlálók céljára használt félvezető anyagnak nagy fajlagos ellenállásúnak kell lennie. Emellett az átfolyó egyenáram nem lehet nagy a detektor korlátozott disszipációs teljesítménye miatt sem. Például, ha 1000 ohmcm-es szilíciumból 5 mm átmérőjű, 1 mm vastag korongot használunk, akkor a detektor ellenállása mintegy 500 ohm lesz. Ha  $10^3$  V/cm-es térerősséget akarunk elérni, mely  $2 \times 10^{-7}$  sec-es töltésösszegyűjtési időt biztosít, akkor a detektoron átfolyó 0,2 amperes áram 20 W teljesítményt fog létrehozni. Tehát az ilyen, viszonylag nagy, 1000 ohmcm-es fajlagos ellenállás még ebből a szempontból sem elég nagy. A gyakorlatban előforduló félvezető anyagok ellenállása mind kicsi ahhoz, hogy olyan térfogati vezetési számlálókat készítsünk belőlük, amelyek szobahőmérsékleten részecskék egyedi regisztrálására alkalmasak lennének. A nagy vezetőképességet az anyagokban levő ionizálódó szennyeződések és a természetesen generált töltéshordozók okozzák.

Különleges tisztaságú anyag nagyon alacsony hőmérsékleten történő alkalmazásával a vezetőképesség annyira csökkenthető, hogy a szükséges gyűjtőtélerősség használható. Más esetekben a szennyeződések okozta vezetőképességet a számlálóanyagba vitt kompenzáló adalékokkal lehet csökkenteni, mint az arannyal adalékolt szilíciumnál [7] vagy az oxigénnel szennyezett gallium arzenidnél [8]. Sajnos azonban ez a töltéshordozók élettartamának nagyfokú csökkenésével jár, ami a begyűjtési hatáskört rontja.

A fentiek miatt a térfogati számlálók nem nagyon váltak be a gyakorlatban. Sokkal jobb eredményt lehet elérni a záróréteges detektorokkal. A záróréteg a félvezető kristályokban lép fel, az  $n$ -típusú (donor-feleslegű) és a  $p$ -típusú, (akceptor-feleslegű) félvezető rétegek között. Az érintkező vékony réteg elszegényedik töltéshordozókban, ezáltal a szennyezőatomok ionizálódnak, pozitívan az  $n$ -rétegben és negatívan a  $p$ -rétegben. Kialakul egy erős dipol-tér, mely gyorsan összegyűjti a töltött elemi részecske által létrehozott elektron-lyuk párokat. A diódára záróirányban rákapcsolt feszültség kiszélesíti a tértöltési tartományt, mely növeli a részecskét detektáló érzékeny térfogatot.

Példaképpen nézzük meg az 1a ábrát [1]. Ez vázlatosan egy  $p-n$  átmenet energiasávját mutatja be egyensúlyi állapotban, azaz külső feszültség rákapcsolása nélkül. Ebben az esetben az átmenet egy eredetileg nagytisztaságú,  $p$ -típusú anyagba, kis mélységbe diffundáltatott donor szennyezettséggel készült. A felületi réteg  $n$ -típusú, nagy elektronkoncentrációval. Belül az anyag  $p$ -típusú, viszonylag kis lyukkoncentrációval. Az elektronok igyekeznek jobbra diffundálni, ahol viszonylag kevés van belőlük, a lyukak pedig hasonlóan balra, ami létrehozza az adott potenciálfalat. A tértöltési tartomány úgy alakul ki, hogy az egyik oldalon donorok vannak a megfelelő számú elektron nélkül, a másik oldalon pedig akceptorok, megfelelő számú lyuk nélkül. Együttesen a tértöltési tartomány egyenlő számú pozitív donorral és negatív töltésű akceptorral kell hogy rendelkezzen. Mivel az akceptorok sűrűsége viszonylag kicsi, a tértöltési tartomány sokkal szélesebb a  $p$ -oldal irányában, mint az  $n$ -oldaléban. A potenciál különbség a két oldal között mintegy 0,5 V lehet és a tértöltési tartomány vastagsága meghaladhatja a  $10^{-3}$  cm-t.

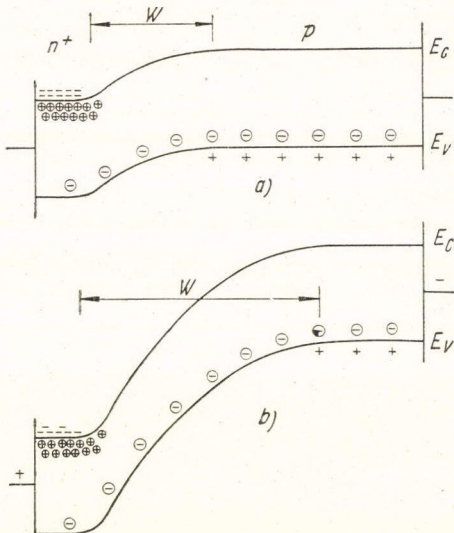
A tértöltési tartomány vastagságát külső záróirányú feszültség rákapcsolásával növelni lehet. Ezt mutatja az 1b ábra.



A  $p-n$  átmeneti rétegnek a kristály felszínéhez közel kell lennie ahhoz, hogy a töltött részecskék lehetőleg teljes energiájukat a tér töltési tartományban adják le. Mint az előbb említettük, ezt a záróréteg elrendezést úgy érhetjük el, hogy kis szennyezőanyag koncentrációjú félvezetőbe a felületen viszonylag jelentős mennyiségű, ellentétes típusú szennyezőanyagot diffundáltatunk be.

Ezeket az ún. diffúziós zárórétegű detektorokat több helyen állítják elő sikerrel. Másik lehetőség az, hogy kihasználják a felületi záróréteget, mely a tiszta germánium felületén jön létre.

A félvezető anyagok felszínén a kristályrács potenciálja hirtelen megváltozik, ez olyan új, megengedett energianívókat hoz létre, melyek a végtelen, ideális kristályrácsban nincsenek meg. Az új energianívók a felületen lokalizáltak és az  $n$ -típusú szilíciumban ugyanúgy viselkednek, mint az elektronakceptorok által létrehozott nívók. Ha az anyag felületén az akceptornívók túlsúlyba kerülnek, akkor az anyag  $p$ -típusúvá válik. A kristály felszíne és belseje között kialakul a  $p-n$  átmenet, az ún. felületi záróréteg. Elősegíti a záróréteg kialakulását az, hogy a felület könnyen oxidálódik és ez az oxidréteg szintén elektronakceptorként viselkedik.



1. ábra. Diffúzióval előállított  $p-n$  átmenet.  
a) Külső feszültség nélkül  
b) Külső feszültséggel

A felülethez az elektromos érintkezést vékony fémréteg (többnyire arany) vákuumban történő felgőzölésével lehet biztosítani. Ha a felület és a félvezető anyag közé záróirányú feszültséget kapcsolunk, akkor a záróréteg vastagságát jelentősen növelhetjük, bizonyos esetekben akár 1 mm-re is.

### III. Előállítási módszerek

#### III. 1. Felületi záróréteges detektorok [9, 10, 11, 12, 13, 14]

Ez a legegyszerűbben előállítható detektortípus, melyet minden átlagosan felszerelt laboratórium elkészíthet.

A kiindulóanyag nagytisztaságú,  $n$ -típusú szilícium vagy germánium öntecs. Ezek a kereskedelembe kapható öntecsek általában zónás átkristályosítással készülnek, egyenletes keresztmetszettel. A fajlagos ellenállás értékét és a kisebbségi töltéshordozók élettartamát a gyárak rendszerint végig megméri a kristály felületén. Ezeket az adatokat fel lehet használni a szükséges alanyag kiválasztásához. A felületi záróréteges módszernél a kristály feldolgozása hideg állapotban történik, s ezért a töltéshordozó élettartamára vonatkozó adatok nem változnak meg.

A detektorhoz szükséges kristályt először szeletekre vágják. A vágást precíziós gyémántbetétes tárcsával végzik. Ezzel a módszerrel 0,2 mm vastag szeletek is vág-



hatók, a vágási veszteség szeletenként nem haladja meg 0,15 mm-t. Külön előny az, hogy a vágási felületek simák. A vágásnál keletkezett egyenetlenségeket csiszolással távolítják el. A csiszolóport egyre finomabbra választva, karcolásmentes, nagyon sima, matt felületet lehet kapni. A matt felületű kristályt zsírtalanítás után tűkőrfényesre marják. Az általánosan használt marószerszám (CP 4A) összetétele a következő:

- 3 térf. rész folysav (HF).
- 3 térf. rész konc. salétromsav.
- 5 térf. rész jégecet.

A marószerszám eltávolítja a vágásnál és csiszolásnál megsértett felületet és majdnem ideális, teljesen tiszta kristályfelület jön létre.

Marás után öblítés következik ioncserélt vízben, majd gondos szárítás. A megszáritott kristályokat 1–2 napig állni hagyják, ezalatt kialakul a felületen a szükséges oxidréteg.

Az így előkészített lapra, melyen egyik oldalon az egyenirányító réteg van, vákuumban aranyat párolnak, a másik oldalra ohmikus kontaktust készítenek.

Az aranyréteg vastagságát  $20\text{--}50\text{ }\mu\text{g}/\text{cm}^2$ -re szokás választani. Nagy áthatolóképességű részecskék esetén a kisebb felületi ellenállású, vastagabb aranyréteg a kedvezőbb, míg a kis hatótávolságú nagy fajlagos ionizálóképességű részek (pl. hasadványok) méréséhez készített detektoroknál célszerűbb a  $10\text{--}20\text{ }\mu\text{g}/\text{cm}^2$ -es aranyvastagság, melynek elektromos tulajdonságai kedvezőtlenebbek, de a holt-réteg vastagság kisebb.

Az ohmikus kontaktusok készítésére többféle módszert használnak. A kivezetést közvetlenül a kristályra is fel lehet erősíteni vezető ezüstpasztával,<sup>1</sup> vagy előzetesen aranyat, esetleg alumíniumot felpárolni s ehhez ragasztani a kivezetést. Sok helyen használnak áram nélkül felvitt nikkelréteget ohmikus kontaktusnak, ehhez a kivezetést ezüstpasztával vagy ónnal, indiummal végzett forrasztással erősítik. Ezután a detektorokat tokozzák.

### III. 2. Diffúziós zárórétegű detektorok [14, 15, 16]

Ezek a detektorok általában *p*-típusú alapanyagból készülnek. Ennek oka az, hogy könnyebb jóminőségű nagy tisztaságú *p*-típusú szilíciumot előállítani, mint *n*-típusút, emellett a *p*-típusnál a foszfor diffúziója egyszerűbb, mint az *n*-típusnál használatos bóré. A detektor készítés első lépései a marásig bezárólag megegyeznek a felületi záróréteges technikánál leírtakkal.

Marás után a szilícium egyik oldalára alumíniumot, a másik oldalára foszfortartalmú szerves vegyületet visznek fel. A kristályt egy-két óráig  $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on tartva végbemegy az alumínium és a foszfor diffúziója. Lehűlés után az egyik oldalon az alumínium *p*<sup>+</sup>-réteget ad, mely az ohmikus kontaktust biztosítja, a másik oldalon a foszfor vékony, mintegy  $1\text{ }\mu$  vastag *n*-réteget hoz létre. A záróréteg a foszfordiffúzióval előállított *n*-réteg és a *p*-típusú alapanyag között keletkezik.

A két előállítási technológia közül a felületi záróréteges az egyszerűbb, segítségével jobb minőségű detektorok állíthatók elő. Hátránya az, hogy a kész eszköz

<sup>1</sup> Az ezüstpasztát egy műanyag alapú, vezető tulajdonságú ragasztó, mely hő hatására köt.

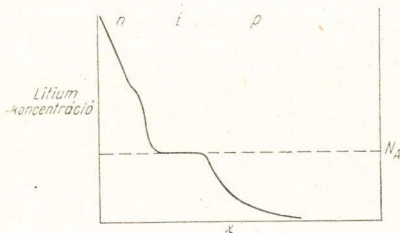
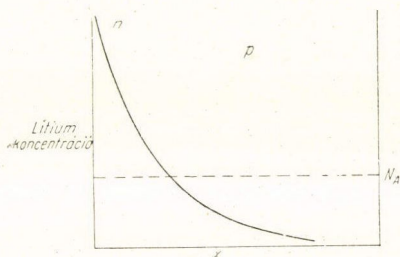


sokkal kényesebb, mint a diffúziós zárórétegű detektor, emellett nehezebb hidegen jó minőségű ohmikus kontaktust készíteni a felületi záróréteges detektorhoz. A diffúziós technológia bár bonyolultabb, de széria gyártásra alkalmasabb, jobban tokozható s mechanikus ellenállóképessége révén általános felhasználásra megfelelőbb detektorok készíthetők segítségével.

### III. 3. Litium-ion drift detektorok [14, 17, 18]

Meg kell még emlékezni a litium-ion diffundáltatással előállított számlálókorról. Ezek működése és felépítése elvileg nem különbözik a diffúziós technológiával előállított detektortól, azonban a gyártás egyes lépései egészen eltérőek. A litium-ionok diffúziójára azért van szükség, mert ezzel a módszerrel kompenzálni lehet a leggazdaságosabban előállított  $p$ -típusú anyagban megmaradó bór szennyeződést, s így az eredetileg maximálisan 20 000 ohmcm körüli fajlagos ellenállást 200 000 ohmcm-es, a saját vezetőség szilíciumra jellemző értékig növelni. A litium azért alkalmas a kompenzációra, mert mint donor szennyezőanyag semlegesíti az akceptor-ként szereplő bór és nagy diffúziós sebessége technológiailag is megfelelővé teszi a diffúziós eljáráshoz.

Litium diffúziós eljáráshoz vastagabb (3–6 mm-es) 1–1000 ohmcm-es,  $p$ -típusú kiinduló szeleteket választanak. A szeletek egyik felületére litium tartalmú vegyületet visznek fel és azt 400–500 °C hőmérsékleten néhány percig diffundáltatják a szilíciumba. A diffúziós mélység 100–200  $\mu$  között szokott lenni, ahol egy erősen  $n$ -típusú réteg alakul ki. Ezután mind a  $p$ -réteghez, mind az  $n$ -réteghez ohmikus kontaktust készítenek. A kristályt 200 °C-ra melegítve és a kontaktusokra



2. ábra. Litium-ion drift folyamat.

a) Diffúzió után.

b) Drift-folyamat után. (Az  $i$ -réteg saját vezetőségű szilícium, mely kompenzálatlan szennyezést nem tartalmaz.)

néhány óráig záróirányú feszültséget kapcsolva elérhetjük azt, hogy az eredeti, a 2a ábrán levő litium eloszlás helyett a 2b ábrán látható eloszlást nyerjük. Ennek a magyarázata az, hogy azon a helyen, ahol a litium-ion koncentráció azonos az akceptor koncentrációval, ott a legnagyobb a fajlagos ellenállás és ennek megfelelően a télerősség is, itt a legerősebb a csökkent litium koncentrációjú rész irányába végbemenő drift. A drift eredményeképpen vastag, 4–5 millimétert is elérő saját vezetőségű réteget lehet nyerni.

A fenti technológiával előállított detektorok előnye az, hogy nagy hatótávolságú részecskék és gamma sugárzás is mérhető segítségükkel. Hátrányt jelent a jelentős holtréteg és a nehézkes előállítási technológia. A detektorokban levő litium szobahőmérsékleten is tovább diffundál, növekszik az ablakvastagság. Ezt a jelenséget a detektorra állandóan rákapcsolt zárófeszültséggel lehet megakadályozni.

Gamma sugárzás spektrometriájára a szilícium kis rendszáma (kis fotoelektromos abszorpciója) miatt csaknem alkalmatlan. Hűtött,

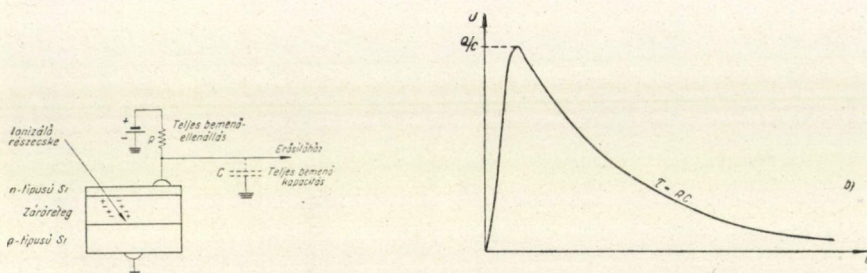


litium-drift germánium detektorokkal lényegesen jobb eredmény érhető el. A technológiai és tárolási nehézségek azonban a germánium *n-i-p* spektrométereknél fokozottabban jelentkeznek, ezért használatuk egyelőre szélesebb körben nem terjedt el.

#### IV. Főbb tulajdonságok

##### IV. 1. Jelalak, jel nagyság

Vizsgáljuk meg a félvezető detektorban jeletkező jel alakját és nagyságát. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy a részecske teljes energiáját a zárórétegben adja le. A zárórétegben a töltött részecske  $10^{-12}$  sec nagyságrendű idő alatt fékeződik le, elektron-lyuk párokat keltve (3. ábra). Ezeket a töltéshordozókat



3. ábra. A félvezető detektor működése és jelalakja.

- A zárórétegben az ionizáló részecske hatására elektronlyuk párok keletkeznek, amelyeket az elektromos tér kiránt a rétegből
- A detektor kimenetén egy gyors felfutású impulzus keletkezik, melynek lecsengése a teljes bemenőellenállástól és kapacitástól függ

a detektorra kapcsolt  $10-100$  V feszültség  $10^{-8}-10^{-7}$  sec alatt ki is rántja a  $0,1-1$  mm vastag zárórétegből, mert a töltéshordozók mozgékonyasága a félvezetőkből eléri, sőt meg is haladja a  $10^3$  cm<sup>2</sup>/Vsec-et. (A detektorfeszültség és a rétegvastagság kiválasztásának kérdésével a IV. 2 és IV. 4. pontban foglalkozunk.) A jel lecsengése exponenciális, időállandója a detektor és az azt követő erősítő bemenet teljes időállandója.

Egy elektron-lyuk pár keltéséhez szilíciumban  $3,5$  eV, germániumban  $2,8$  eV szükséges. Ennek megfelelően a detektorban keletkező töltés szilíciumban  $4,5 \times 10^{-14}$  Coulomb/MeV, germániumban  $5,6 \times 10^{-14}$  Coulomb/MeV. Ez a töltés jelenik meg az erősítőrendszer bemenetén, ha a töltés összegyűjtése veszteség nélkül megy végbe. A keletkező feszültségimpulzus amplitúdója

$$U = \frac{Q}{C_{\text{teljes}}}$$

ahol  $Q$  — a zárórétegben keletkező töltés,  $C_{\text{teljes}}$  — az erősítő bemenetén jelentkező összes kapacitás, mely a detektor és az erősítő bemeneti kapacitása mellett a szórt kapacitásokat is magában foglalja, tehát

$$C_{\text{teljes}} = C_{\text{det}} + C_{\text{erősítő}} + C_{\text{szórt}}$$



A leggyakrabban használt detektorok kapacitása 10–30 pF; 30 pF-os teljes kapacitás esetén a jel nagyság kb. 1,5–2 mV/MeV.

A detektor kapacitását úgy számíthatjuk ki, mint egy síkpárhuzamos kondenzátorét:

$$C_{\text{det}} = \frac{A \cdot \varepsilon}{4\pi l} \quad (pF)$$

ahol  $A$  — a detektor felülete  $\text{cm}^2$ -ben,

$\varepsilon$  — a relatív dielektromos állandó ( $\varepsilon_{\text{Si}} = 12$ ,  $\varepsilon_{\text{Ge}} = 16$ ),

$l$  — a záróréteg vastagsága  $\text{cm}$ -ben

#### IV. 2. Záróréteg vastagság [15, 19, 20]

$P-n$  átmenet esetén a záróréteg mindkét típusú tartományba behatol. A behatolási mélységet a Poisson-egyenletet és az átfolyó áram folytonosságát kielégítő feltételek alapján kaphatjuk meg. A  $p$ -rétegre ez:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{4\pi e}{\varepsilon} (N_A + n - p) \quad (1)$$

ahol  $V$  — a potenciál,  $X$  — a távolság a  $p$ -réteg határától,  $e$  — az elektron töltése,  $N_A$  — az akceptor szennyezés koncentrációja,  $n$  és  $p$  — a helyi elektron és lyuk-koncentráció és  $\varepsilon$  — a kristály dielektromos állandója.

A zárórétegben  $n$  és  $p$  sokkal kisebb az  $N_A$ -nál. Ekkor

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{4\pi e}{\varepsilon} N_A \quad (2)$$

mely kétszeres integrálás és a határértékek behelyettesítése után a

$$V = \frac{2\pi e N_A}{\varepsilon} (x^2 - 2xX_p) + V_0 \quad (3)$$

kifejezést adja, ahol  $X_p$  a záróréteg vége, itt  $N_A + n - p = 0$ ,  $V_0$  — a fellépő kontaktspotenciál. Amikor  $X = X_p$ , akkor  $V - V_0 = V_p$ , ami a  $p$ -rétegben fellépő potenciálkülönbség és

$$X_p^2 = \frac{V_p \varepsilon}{2\pi N_A e} \quad (4)$$

Hasonlóan

$$X_n^2 = \frac{V_n \varepsilon}{2\pi N_D e} \quad (5)$$

A  $V_0$ -érték, mely az  $n$  és  $p$ -réteg Fermi-nívóinak különbségéből származik, szilíciumnál kb. 0,7 V. germániumnál 0,4 V. Az  $n$  és  $p$ -réteg töltés egyenlőségének feltételéből következik, hogy

$$X_p N_A = X_n N_D \quad (6)$$

A fentiek szerint a záróréteg mélysége az  $n$ , illetve  $p$ -tartományban fordítva arányos a tartományok szennyezéskonzentrációjával és egyenesen arányos az



anyag ellenállásával, mert

$$\varrho_p = \frac{1}{N_A e \mu_p} \quad \text{és} \quad \varrho_n = \frac{1}{N_D e \mu_n} \quad (7)$$

ahol  $\varrho$  — a félvezető anyag fajlagos ellenállása,  $\mu_p$  ill.  $\mu_n$  — a lyukak és az elektronok drift mozgékonyasága.

Az alapanyagon diffúzióval, vagy a felületi jelenségek révén létrehozott záróréteg a felületen viszonylag nagy, az alakristállyal ellentétes típusú szennyeződés koncentrációt jelent. Ebből következik, hogy a záróréteg zömmel a kristály bel-seje felé terjed. Ha a kristály nagy ellenállású,  $p$ -típusú alapanyagból készült, akkor közelítőleg a teljes záróréteg vastagság

$$X = \frac{\varepsilon V}{2\pi e N_A} \quad (8)$$

vagy a (7) alapján

$$X = \left( \frac{\varepsilon \mu_p}{2\pi} \varrho_p V \right)^{\frac{1}{2}} \quad (8a)$$

Hasonlóan az  $n$ -típusú alapanyagra

$$X = \left( \frac{\varepsilon \mu_n}{2\pi} \varrho_n V \right)^{\frac{1}{2}} \quad (8b)$$

Közelítőleg  $p$ -típusú szilíciumnál

$$X = 3,2 \times 10^{-5} (\varrho V)^{1/2} \text{ cm}$$

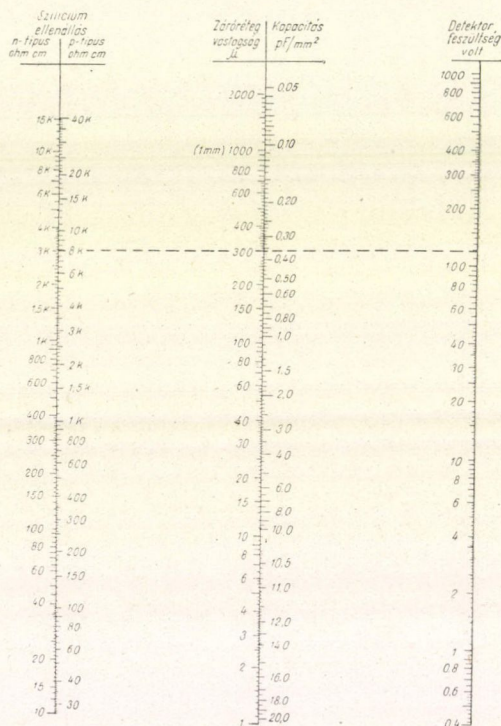
$n$ -típusnál

$$X = 5,3 \times 10^{-5} (\varrho V)^{1/2} \text{ cm}$$

ahol  $\varrho$  ohmcm-ben,  $V$  voltban van kifejezve.

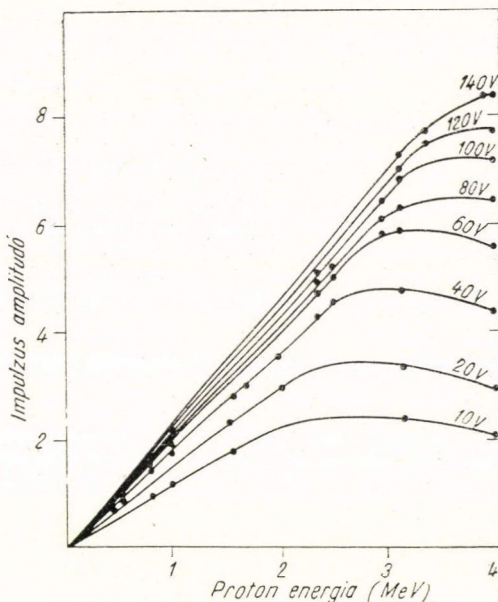
A zárórétegvastagság és a detektor-kapacitás kényelmes és gyors meghatározására az ORTEC (Oak Ridge Technical Enterprises Corporation, USA) nomogramot dolgozott ki (4. ábra).

A záróréteg vastagságát a detektor kapacitásának mérésével állapíthatjuk meg. Másik elterjedt módszer az, hogy mérjük a kijövő impulzusok nagyságát a bombázó energia függvényében. Ilyen mérés eredményét mutatja az 5. ábra [9]. A görbék alapján látható, hogy a lineáris tartomány után, a bombázó részecskék energiáját növelve, bár a zárórétegben leadott energia csökken, a jelamplitúdó tovább növekszik. Ezt az okozza, hogy a záróréteg mögött keletkező elektron-lyuk párok egy része is eljut a záróréteghez diffúzió útján.



4. ábra. Nomogram a szilícium félvezető detektor záróréteg vastagságának és kapacitásának megállapítására az alapanyag fajlagos ellenállása és a detektorfeszültség alapján





5. ábra. Egy 300 ohmcm-es szilíciumból készült detektor impulzusamplitúdójának a bombázó protonenergiától való függése különböző detektorfeszültségeknél

Az egyes áramok nagysága  $\text{nA/cm}^2$ -ben a következő:

	Generációs ( $I_g$ )	Diffúziós ( $I_d$ )
n-típusú alapanyagnál	$63 \frac{(\varrho V)^{\frac{1}{2}}}{\tau_0}$	$1,04 \frac{\varrho l}{\tau_0}$
p-típusú alapanyagnál	$38 \frac{(\varrho V)^{\frac{1}{2}}}{\tau_0}$	$2,75 \frac{\varrho l}{\tau_0}$

ahol  $\varrho$  — az anyag fajlagos ellenállása ohmcm-ben,

$V$  — a detektorfeszültség V-ban.

$\tau_0$  — a kisebbségi töltéshordozók élettartama  $\mu\text{sec}$ -ban,

$l$  — az a távolság, ahonnan a töltéshordozók a záróréteghez diffundálhatnak. (Vastag detektoroknál ez a diffúziós hossz, vékony detektoroknál a detektor vastagság.)

A közölt képletek alapján látható, hogy a diffúziós áram lényegében független a detektorfeszültségtől, míg a generációs áram arányos a záróréteg vastagságával, azaz a detektorfeszültség négyzetgyökével. Így mód nyílik a két komponens szétválasztására, ha felvesszük a detektoráram feszültségfüggését [21].

A diffúziós áram a szokásos mérési beállításoknál általában sokkal kisebb, mint a generációs áram és így elhanyagolható.

A diffúzió a zárórétegben keletkező töltéshordozók begyűjtési idejéhez képest lassú folyamat, ezért az erősítő időállandójától függ a görbe menete a lineáris tartomány után. A bombázó részecske hatótávolságának növekedése azt eredményezi, hogy az ionizációnak egyre nagyobb része következik be a záróréteg után, ahonnan a töltés begyűjtés feltételei rosszak s ennél fogva egy maximális érték után a jelamplitúdó csökkenni kezd.

#### IV. 3. Visszáram [19]

A detektorok visszaráma ideális esetben generációs és diffúziós összetevőkből áll. A generációs áram a tértöltési tartományban időegység alatt termikus hatásra keletkezett töltéshordozók számával arányos, a diffúziós áram pedig a detektor teljes anyagában keletkezett töltéshordozók mennyiségével arányos, melyek diffúzióval jutnak el a zárórétegig.



Gyakorlatban a kristály felszíne nem ideális felület, rajta szennyeződések és mechanikus sérülések vannak, ezek felületi áramot okoznak. Az ilyen típusú áramok számításal általában nem követhetők és káros hatásuk miatt lehetőleg teljesen ki kell őket küszöbölni. Ennek módja a megfelelő technológia kiválasztása és a maximális tisztaság biztosítása. Gyakran megoldást jelent a detektor felületére párolt védőgyűrű [22], mely az ionizációs kamrákhoz hasonlóan a felületi átvezetési áramot csökkenti.

#### IV. 4. Felbontóképesség

A detektor felbontóképességét általában a következő tényezők befolyásolják:

1. Az elektron-lyuk pár képződés statisztikus jellege.
2. A detektorban lejátszódó rekombinációs jelenségek.
3. Detektor zaj.
4. Erősítő zaj.

Tekintsük át részletesebben a felsorolt tényezőket.

##### Statisztikus korlátok

Ha a félvezető detektorban az ionizáló részecske által keletkezett teljes töltést összegyűjtjük, akkor az elektron-lyuk pár képződés statisztikus jellegéből a következő viszonylagos félértékszélességet kapjuk:

$$\frac{\Delta q}{q} = 2,36 \frac{1}{\sqrt{N}} = 2,36 \sqrt{\frac{W}{E}}$$

ahol  $\frac{\Delta q}{q}$  a töltéseloszlás Gauss-görbéjének viszonylagos félértékszélessége,

$N$  — a keletkezett töltéshordozók száma,

$W$  — egy elektron-lyuk pár keltéséhez szükséges energia,

$E$  — a részecske által leadott energia.

A fent megadott értéket befolyásolja a Fano-tényező, amely az ionizációs jelenségek korrelációját fejezi ki. Ezt a tényezőt félvezető anyagoknál nem ismerik [13], de a feltételezések szerint 1-hez közel áll.

A leírtak alapján hasonlítsuk össze az argon-metán töltésű Frisch-féle rácsos ionizációs kamrát és a szilícium félvezető detektort.

A felbontóképesség statisztikus határa 5,3 MeV-es alfa részekre:

Gázban:

$$w = 28 \text{ eV/pár}$$

$$\sigma = 270 \text{ pár}$$

$$\sigma = 7,5 \text{ keV ekvivalens}$$

$$\frac{1}{3} < F < \frac{1}{2}$$

$$\frac{\Delta q}{q} = 2,36 \sigma = 18 \text{ keV ekvivalens}$$

Szilíciumban:

$$w = 3,5 \text{ eV/pár}$$

$$\sigma = 1200 \text{ pár}$$



$$\sigma = 4,4 \text{ keV ekvivalens}$$

$$\frac{\Delta q}{q} = 10 \text{ keV ekvivalens, ha } F = 1$$

$$\frac{\Delta q}{q} = 6 \text{ keV ekvivalens, ha } F = 1/2,5$$

ahol  $\sigma$  — a részecskék számának egyszeres statisztikus hibája,  $F$  — Fano tényező.

Ha az ionizáló részecske energiájának csak egy kis hányadát adja át a detektornak, akkor a Landau-hatás miatt a felbontóképesség romlik. A Landau-hatás azt jelenti, hogy ha egy részecske energiájának csak kis részét adja le az érzékeny rétegben és az energiaátadásban egyes elektronok nagy energiát vesznek fel (ún. delta sugarak képződnek), akkor ezek az események kis számban következnek be. A kis számú esemény és az azokban átadott energia viszonylagos statisztikus ingadozása sokkal nagyobb, mint amikor egy részecske a teljes energiáját az érzékeny rétegben adja le és a delta sugarak statisztikus jellegű keletkezése nem játszik szerepet.

### Rekombináció [24]

Az ionizáló részecske pályája mentén keletkezett töltéshordozók egy része rekombinálódik, mielőtt még elérné a gyűjtőelektródát. Ha a rekombináció mértéke nem egyenletes az egész kristályban, akkor a kimeneten fellépő töltésimpulzus amplitúdója attól fog függeni, hogy a kristály melyik részében volt az ionizáló részecske pályája. A pálya mentén keletkezett töltéshordozók az első pillanatban egy közel vezető plazmafonalat hoznak létre, melyben az elektronok és lyukak elkülönülése a külső elektromos tér hatására nem történhet meg. Ekkor, mivel nagy a töltéshordozók koncentrációja, a nyomon belül történő rekombináció valószínűsége fokozott. Különösen jelentős mértékű a rekombináció foka a nagy fajlagos ionizációs képességű részecskék (hasadási részek, többszörösen töltött ionok stb.) esetén. A rekombináció mértékének statisztikus ingadozása felbontóképesség romlást és látszólagos töltéscsökkenést (ionizációs defektust) okoz. A rekombináció szempontjából inhomogén kristályban a rekombinációs veszteség rendszerint nem írható le a szokásos statisztikus törvényekkel.

A töltéshordozók  $10^{-9}$  sec nagyságrendű idő után diffundálnak szét annyira, hogy a külső elektromos tér hatása alá kerülnek [20]. Ezután az elektronok és lyukak begyűjtési idejét már a töltéshordozók mozgékonyasága, a zárórétegben levő térerősség és a geometriai tényezők fogják megszabni. A kb.  $10^{-8}$  sec-es begyűjtési idő alatt (lásd a IV. 5. pontban) a töltéshordozók egy része szintén rekombinálódhat. A jóminőségű szilíciumban a kisebbségi töltéshordozók élettartama 0,1–1 msec és emiatt a rekombinációs veszteségek elhanyagolhatók ebben a folyamatban. Egyes helyeken a diszlokációs centrumok, amelyek körül a szennyeződések összegyűlnek, a töltéshordozók élettartamát helyileg nagyságrendekkel csökkenthetik. Ezeken a helyeken már számottevő rekombinációs veszteségek léphetnek fel, melyek nemcsak a felbontóképesség romlásához, hanem több, látszólagos energiacsúcs fellépéséhez is vezethetnek.

A diffúzióval készült detektoroknál a töltéshordozók élettartamát a technológiai eljárás folyamán alkalmazott erős melegítés általában jelentősen csökkenti. Ezért szokott az ilyen detektoroknál gyakrabban jelentkezni a többszörös energia-



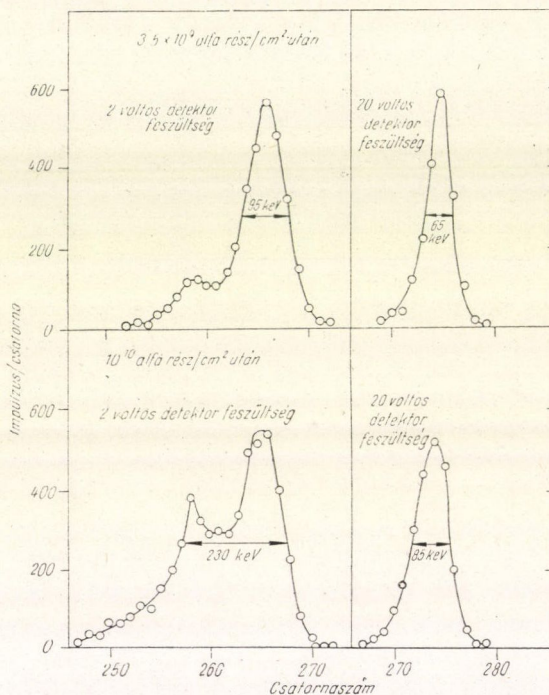
csúcs és a rosszabb felbontóképesség, mint a felületi záróréteges detektoroknál. Könnyen belátható, hogy a sugárkárosodás a melegítéshez hasonló jelenségeket válthat ki.

A detektor feszültség növelésével a töltés összegyűjtési ideje megrövidül és a rekombináció valószínűsége csökken. Ha a detektor felbontóképessége rekombinációs okból volt rossz, akkor a feszültség növelésével a felbontóképesség jelentősen meg szokott javulni. Az új félvezető detektorokban ez a hatás rendszerint nem észlelhető, ép és szennyezetlen kristályrácsban a rekombinációs veszteségek elenyészőek. Hosszabb intenzív besugárzás után a kristályban nagyszámú rácshiba keletkezik s ekkor a rekombinációs veszteségek miatt jelentős felbontóképesség romlás következik be. A felbontóképesség erősen feszültségfüggővé válik, nagyobb feszültségnél a detektor felbontóképessége lényegesen jobb lesz, mint kisebb feszültségnél. Ennek illusztrálására különböző alfa-részecske fluenssel (fluens az  $1 \text{ cm}^2$  felületen összesen átment részecskék száma) besugárzott szilícium detektorral felvett, monoenergetikus,  $5,5 \text{ MeV}$ -es alfa spektrumot mutatunk be a 6. ábrán. Jól láthatjuk, hogy mennyire függ a csúcs alakja és szélessége a detektorfeszültségtől.

#### Detektor és erősítő zaj [19]

A záróréteges félvezető detektort úgy tekinthetjük, mint egy szilárd, félvezető töltőanyagú ionizációs kamrát és a zajszámítás szempontjából az ionizációs kamrához hasonlóan járhatunk el azzal a különbséggel, hogy a félvezető detektor belső ellenállása kisebb, kapacitása pedig nagyobb, mint az ionizációs kamráé. Ennek megfelelően az optimális paraméterek mások lehetnek, mint ionizációs kamrák esetén. Tekintsük át a különböző zajforrásokat. A zajforrásokra vonatkozó képleteket az 1. táblázat tartalmazza. Az ott szereplő képletek egyszeres differenciálást és integrálást tételeznek fel, azonos differenciáló és integráló időállandóval. Továbbá követelmény az, hogy a detektor saját jelfelfutási ideje lényegesen rövidebb legyen, mint az erősítő időállandója.

A táblázatban közölt zajforrások közül a gyakrabban előforduló esetekben legjelentősebb a cső sörétzaja és a detektor visszarámából eredő zaj. Ezzel a felté-



6. ábra.  $5,5 \text{ MeV}$ -es monoenergetikus  $\alpha$ -részecskék impulzusamplitúdó eloszlása két különböző  $\alpha$ -rész expozíció után, 2 és 20 V-os detektorfeszültségnél. A felületi záróréteges detektor  $1000 \text{ ohm cm}$ -es fajlagos ellenállású szilíciumból készült



telezéssel, elhanyagolva a többi zajkomponenst, kiszámítható a legmegfelelőbb erősítő időállandó:

$$\tau_{\text{opt}} = \frac{0,35 C}{\sqrt{g_m I_v}}$$

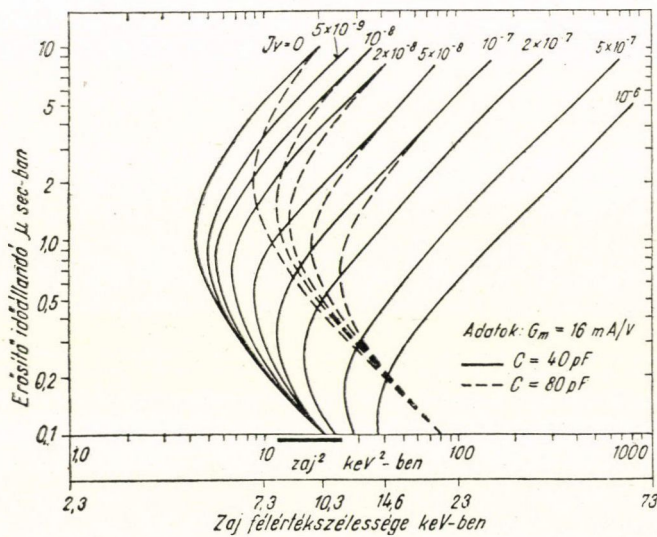
ahonnan

$$zaj_{\text{opt}}^2 = 4 \times 10^{-2} \frac{C^2}{g_m \tau_{\text{opt}}} \text{ keV}^2 = 0,11 C \sqrt{\frac{I_v}{g_m}} \text{ keV} \quad (9)$$

Ebből a felbontási görbe félértékszélessége:

$$\Delta E_{\text{opt}} \sim 2,3 \sqrt{zaj_{\text{opt}}^2} \text{ keV}$$

Az  $R$  bemenőellenállást célszerű úgy kiválasztani, hogy az általa okozott zaj elhanyagolható legyen. A kedvező érték általában 1–5 Mohm.



7. ábra. A zajérték függése az erősítő időállandójától különböző detektor visszaramoknál

Különböző visszaramok és detektor kapacitás mellett az időállandónak és a felbontóképességnek az 1. táblázat alapján számított összefüggését a 7. ábra mutatja. Az ábrán feltüntetett értékek 5 Mohm-os bemenőellenállásra,  $2 \times 10^{-9}$  A rácsáramra és 16 mA/V-os csőmeredekségre vonatkoznak.

Ha a detektor visszaramának egy részét felületi jelenségek okozzák, úgy a fenti számítások nem adnak helyes eredményt, mert a felületi eredetű zajok  $1/f$  függvényen írhatók le és hasonlóak a pillezajhoz, értékük nem függ az erősítő időállandójától. A jó minőségű detektoroknál azonban a felületi eredetű zajok nem jelentősek és gyakran elhanyagolhatók.



## 1. TÁBLÁZAT

Különböző forrásból eredő zajok eloszlása [19]

Zajforrás	Bemenetre vonatkoztatott négyzetes középzaj (coulomb <sup>2</sup> )	Bemenetre vonatkoztatott négyzetes középzaj (keV <sup>2</sup> )
Cső sörétzaj	$4 \times 10^{-35} \times \frac{C^2}{g_m \tau}$	$2 \times 10^{-2} \times \frac{C^2}{g_m \tau}$
Cső pillezaj	$4 \times 10^{-37} \times C^2$	$2 \times 10^{-4} \times C^2$
Rácsáram	$3,2 \times 10^{-34} \times i_g \tau$	$1,6 \times 10^{-1} \times i_g \tau$
Detektor visszáram	$3,2 \times 10^{-34} \times I_v \tau$	$1,6 \times 10^{-1} \times I_v \tau$
Bemeneti ellenállás zaja	$1,6 \times 10^{-32} \times \frac{\tau}{R}$	$8 \times \frac{\tau}{R}$

Jelölések:  $C$  – a teljes bemeneti kapacitás (pF)  
 $i_g$  – a cső rácsárama (nA)  
 $g_m$  – a cső meredeksége (mA/V)  
 $\tau$  – az erősítő időállandója ( $\mu$ sec)  
 $R$  – a teljes bemeneti ellenállás (Mohm) (feltéve, hogy  $C \times R \gg \tau$ )  
 $I_v$  – a detektor visszárama (nA)

Vizsgáljuk meg, milyen a rendszer zajának a detektor feszültségtől való függése. Ha a (9) egyenletbe beírjuk a generációs visszáram feszültségfüggését (pl.  $p$ -típusú alapanyagra), akkor

$$\text{zaj}^2 = 0,7 \left[ \frac{A}{\tau_0 g_m} \right]^{\frac{1}{2}} \left[ C_{be} (\varrho V)^{\frac{1}{2}} + \frac{2,2 \times 10^4 A}{(\varrho V)^{\frac{1}{2}}} \right] \text{keV}^2 \quad (10)$$

ahonnan

$$V_{\text{opt}} = \frac{5,6 \times 10^8 \cdot A^2}{\varrho C_{be}^2} \text{ volt.}$$

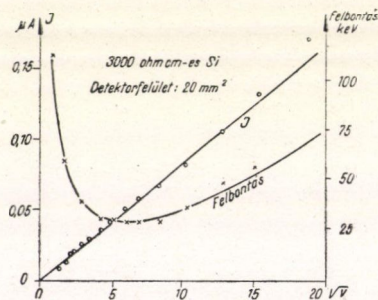
A felbontóképesség (10)-ben megadott jellegű feszültségfüggését a mérési eredmények is alátámasztják, mint azt a 8. ábra is mutatja.

## IV. 5. Jelfelfutási idő

A jel felfutási idejét a töltésszergyűjtés ideje, valamint a detektoráramkör soros ellenállása és kapacitása szabja meg. A jel lecsengése egyértelműen megadható a bemenő kör teljes időállandójával.

A detektor soros ellenállását elsősorban kis fajlagos ellenállású alapanyag és a detektor geometriai arányainak helyes kiválasztásával lehet csökkenteni.

Vizsgáljuk meg a töltésszergyűjtés idejét. A töltésszergyűjtés legrövidebb idejét elvileg a töltött rész lefékeződési ideje határozza meg. Ez az idő a számítások szerint nem haladja meg a  $3 \cdot 10^{-11}$  sec-et.



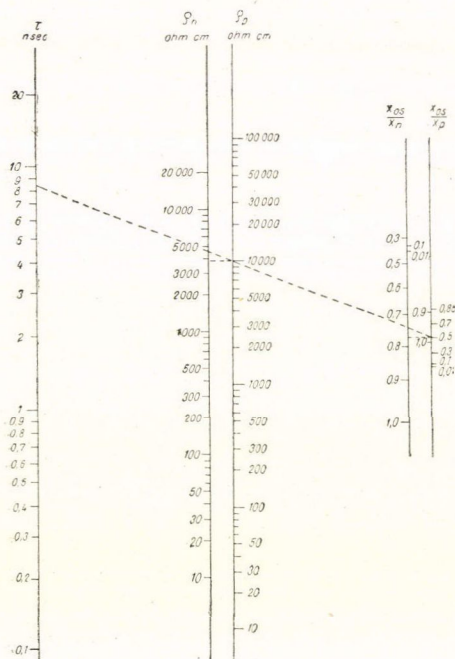
8. ábra. Egy félvezető detektor visszáramának és felbontóképességének a zárófeszültség négyzetgyökétől való függése [9]



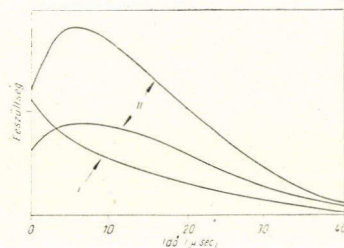
Tove és Falk [20] részletesen megvizsgálták a jel felfutási idejét. Számításaikban feltételezik azt, hogy az elektronok és a lyukak mozgékonyasága állandó és  $dE/dx = \text{const.}$  E munka eredményeként kapott nomogramjukat a 9. ábra mutatja. Erről a töltésszergyűjtés idejét olvashatjuk le a fajlagos ellenállás és a relatív hatótávolság függvényében. A relatív hatótávolság a hatótávolság ( $x_{os}$ ) és a  $p$ , illetve az  $n$ -típusú anyagban létrejövő záróréteg vastagságának ( $x_n$  ill.  $x_p$ ) viszonya. A szerzők kimutatják, hogy a  $dE/dx$  érték és a mozgékonyaság változását figyelembevéve sem módosul jelentősen a töltésszergyűjtés ideje. Ennek alapján láthatjuk,

hogy kedvező körülmények esetén nagyon gyors jelfelfutás érhető el. Az impulzusok a fotoelektronsokszorozók impulzusaihoz képest viszonylag kicsik és ez megnehezíti a gyors felfutás kihasználásához szükséges koincidencia áramkörök fejlesztését, mert a szükséges erősítők beépítése az időbeli felbontást rontja.

Ezzel szemben előnyös, hogy a szcintillációs detektorokra jellemző változó fotoelektron átfutási idő itt nem lép fel.



9. ábra. Nomogram a félvezető detektor elméleti jelfelfutási idejének megállapítására. (Az idő a jelnek a 10%-os értékről a 90%-os értékre való növekedésére vonatkozik.)



10. ábra. Két különböző típusú impulzus oszcillogramja

- I. A részecske a zárórétegben lefékeződik
- II. A részecske áthatol a zárórétegen

A részecske pályája mentén a félvezető anyagban nagyfokú ionizáció jön létre, ami a helyi elektromos teret csökkenti. Ez a jel felfutási idejét nagyságrendileg 1 nsec-al még tovább növelheti.

Az ilyen rövid felfutási idő csak akkor érhető el, ha a részecske teljes energiáját a zárórétegben adja le. Ha a részecske energiájának egy része a záróréteg mögöttvész el (ahonnan a töltéshordozók diffúzió útján jutnak el a záróréteghez), akkor megjelenik egy viszonylag lassú diffúziós összetevő is a jelalakban. Ha ez káros, akkor rövid erősítő időállandót használva a jelenséget csökkenthetjük. Szükség esetén viszont jelalakdiszkriminációval a két különböző alakú impulzust szétválaszthatjuk. E kérdéssel foglalkozik H. O. Funsten [25]. Az általa közölt jelalakokat a 10. ábra mutatja. Jól látható a különbség a két impulzustípus közt.

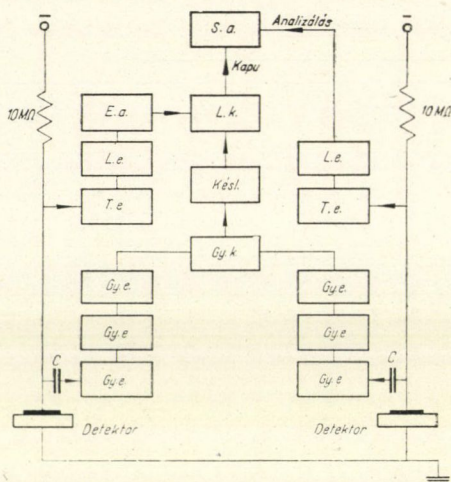


A detektorok gyors jelfelfutását és jó energiafelbontóképességét összetett gyors — lassú koincidenca rendszerrel lehet kihasználni [9]. Az összeállítást a 11. ábra mutatja. A gyors erősítőrendszer sávzélessége 200 MHz-ig terjed, zajszintje viszonylag nagy, 0,5 mV körüli. A töltéserzékeny előerősítő kis zajú, stabil erősítését biztosít, így a jó idő és energia felbontás összekapcsolható.

11. ábra. A gyors — lassú koincidenca összeállítás blokkvázlata.

Jelölések: C — csatoló kondenzátor, kb. 500 pF.

- Gy. e — gyors erősítő.
- Gy. k — gyors koincidenca egység.
- késl — késleltető művonal.
- L. k — lassú koincidenca egység.
- S. a — sokcsatornás analízátor.
- T. e — töltéserzékeny előerősítő.
- L. e — lassú erősítő.
- E. a — egycsatornás analízátor.



#### IV. 6. Ablakvastagság

Ablakvastagságon az adott esetben a detektor felületén levő érzéketlen réteg vastagságát értjük. Az érzéketlen réteg minimális vastagsága megegyezik a záróréteg kivezetésével szolgáló aranyréteg vastagságával. A felületi záróréteges detektorok ablakvastagsága általában kisebb és egyenletesebb, mint a diffúzióval készítették. A diffúzió egyenetlensége és túl nagy mélysége léphet fel zavaró körülményként.

Az aranyréteg vastagsága általában  $50-100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , de sikerrel készítettek  $5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  vastagságú aranyréteget is [26]. Colard és Gal a holtréteg vastagságát gyári, foszfordiffúzióval készített detektoroknál szilíciumra vonatkoztatva  $0,45-1,8 \mu$ -nak találták [27]. Dearnaley és Whitehead beszámolnak felületi záróréteges detektorral végzett mérésekről. Mintegy 200 KeV-os  $\text{C}^{12}$ -ionok detektálása alapján a holtréteget  $<0,03 \mu$  szilícium egyenértékűnek találták, ami sokkal kisebb, mint a diffúziós detektorokkal elért legjobb eredmény. A felületi záróréteges detektoroknál az oxidréteg vastagsága  $10 \text{ \AA}$  nagyságrendű.

#### IV. 7. Háttér

Háttéren az adott esetben a mért sugárzással megegyező háttérsugárzást és más, nagyobb áthatoló képességű kísérő sugárzás zavaró hatását értjük.

Nehéz, töltött részek spektroszkópiájánál elsősorban a detektorokban és a környezetben levő  $\alpha$ -aktív anyagok jelenléte zavar, különösen kis aktivitású sugár-



források mérésénél. A félvezető detektorokhoz használt anyagok rendkívül tiszták, azok szennyeződése elhanyagolható, a környezeti anyagok gondos kiválasztásával az  $\alpha$ -háttér nagyon kicsire leszorítható. Roman és munkatársai beszámolnak egy mérőberendezésről, mely kis  $\alpha$ -aktivitású minták spektrometriájára szolgál [28]. A berendezés háttére egy 48 mm<sup>2</sup>-es szilícium detektor használatakor 4–10 MeV közötti  $\alpha$ -energia tartományban 0,25 imp/óra, 180 mm<sup>2</sup> felületű mozaikdetektornál pedig 4 imp/óra.

Meg kell jegyezni, hogy a félvezető detektorhoz használt erősítőrendszert is gondosan meg kell választani, mert gyakran a látszólagos háttér zömmel elektromos eredetű. Többek között ezért szokás az előerősítő fűtésére egyenfeszültséget használni [29].

Ha az analizálandó nehéz töltött részeket zavaró háttérként  $\beta$ ,  $\gamma$  és neutron-sugárzás kíséri, akkor a félvezető detektornál előnyt jelent az a lehetőség, hogy az optimális érzékeny rétegvastagságot rendszerint könnyen be tudjuk állítani. E sugárzások elleni leghatásosabb védelmet a zárórétegvastagság optimális kiválasztása mellett az áramkörök differenciáló és integráló időállandójának legkedvezőbb értéke biztosítja. Ez az érték 0,2–1  $\mu$ sec között szokott mozogni.

A szilíciumnak és az aranyaknak nincs a termikus neutronokkal nehéz, töltött részt adó magreakciója. A gyorsneutronok a következő módokon tudnak zavaró részeket létrehozni [9, 30]:

1.  $(n, p)$  és  $(n, \alpha)$  magreakciók a szilíciumban. Az ismert reakciók a következők:

$\text{Si}^{28} (n, p) \text{Al}^{28}$ .  $Q = -3,86$  MeV. A  $\text{Si}^{28}$  izotóp aránya 92%. A hatáskeresztmetszet 5 MeV-nél 0,02 barn, majd 8 MeV-ig emelkedik, ott 0,40 barn, és 14 MeV-nél 0,22 barnra csökken.

$\text{Si}^{28} (n, \alpha) \text{Mg}^{25}$ .  $Q = -2,66$  MeV. A reakció hatáskeresztmetszetét 8 MeV-es neutronenergiáig vizsgálták. A hatáskeresztmetszet 6 MeV-nél 0,02 barn, 7 MeV-nél 0,15 barn, és 8 MeV-nél eléri a 0,3 barn értéket.

$\text{Si}^{29} (n, p) \text{Al}^{29}$ .  $Q = -3,20$  MeV. A  $\text{Si}^{29}$  izotóparánya 4,7%. A reakció hatáskeresztmetszete 14 MeV-nél 0,10 barn.

$\text{Si}^{29} (n, \alpha) \text{Mg}^{26}$ .  $Q = -0,03$  MeV. A reakció hatáskeresztmetszete 5–8 MeV tartományban 0,1 barn alatt marad.

$\text{Si}^{30}$ -nál 10 MeV alatti neutronenergiáknál az egyetlen lehetséges magreakció a  $\text{Si}^{30} (n, \alpha) \text{Mg}^{27}$ . A  $\text{Si}^{30}$  izotóparánya 3,1%, a hatáskeresztmetszet 14 MeV-nél 0,05 barn.

A fentiek alapján láthatjuk, hogy a zavaró magreakciók közül a leglényesebbek a  $\text{Si}^{28}$  reakciói a nagy izotóparány és hatáskeresztmetszet miatt.

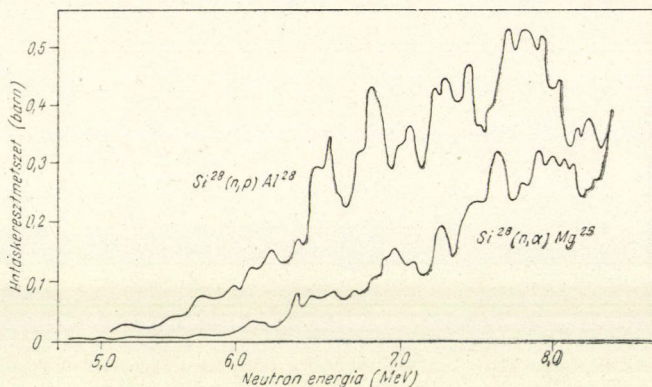
2. Az aranyréteg csak  $(n, \gamma)$  reakcióba lép a neutronokkal. A viszonylag nagy termikus neutron hatáskeresztmetszetet ellensúlyozza az aranyréteg vékonysága.

3. A detektor felületén vízgőz és egyéb hidrogéntartalmú anyagok adszorbeálódhatnak. A hidrogénmagokat a gyorsneutronok meglökhetik. Kedvező, hogy az arany adszorpciós képessége kicsi.

A szilícium magreakciói 5 MeV feletti neutronenergiánál zavaró hatást fejtenek ki. Viszont a félvezető detektornak egyben targetként történő felhasználásával mérték ki a  $\text{Si}^{28} (n, p) \text{Al}^{28}$  és a  $\text{Si}^{28} (n, \alpha) \text{Mg}^{25}$  magreakciók hatáskeresztmetszetét [30]. E két reakció hatáskeresztmetszetének energiaszámítását a 12. ábra mutatja.



A germánium számlálók kevésbé érzékenyek a gyorsneutronokra, mint a szilícium számlálók. A germánium  $(n, p)$  és  $(n, \alpha)$  — hatáskeresztmetszetei lényegesen kisebbek [9, 31], azonos zárórétegvastagság mellett kisebb háttérrel okoznak a gyorsneutronok. Ha figyelembe vesszük azt is, hogy ugyanakkora protonfékező-képességű germániumréteg sokkal vékonyabb, mint a megfelelő szilíciumréteg, ak-



12. ábra. A  $\text{Si}^{28}(n, p)\text{Al}^{28}$  és  $\text{Si}^{28}(n, \alpha)\text{Mg}^{25}$  magreakció hatás-keresztmetszetének energia függése, félvezető detektorral felvéve

kor a germánium előnyös volta még szembetűnőbb lesz. A germánium alkalmazásának jelentős nehézsége viszont az, hogy csak folyékony nitrogén hőmérsékletére hűtve lehet üzemeltetni.

#### IV. 8. Érzékenység külső behatásokra

A félvezető detektor is, mint minden más sugárzás detektor érzékeny külső behatásokra. A félvezető detektorok működését befolyásoló fontosabb tényezők a következők:

1. Sugárkárosodás
2. Káros környezeti anyagok
3. Fény
4. Hőmérséklet
5. Vákuum
6. Mechanikus hatások
7. Mágneses tér.

##### Sugárkárosodás

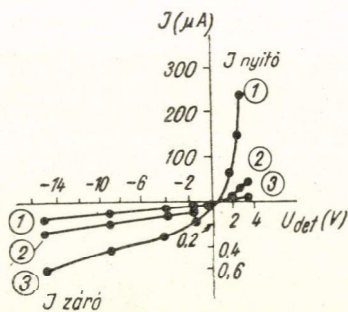
Félvezető detektorok alkalmazásánál elkerülhetetlenül felmerül az a kérdés, hogy mekkora az a sugárdózis, amely nem változtatja meg észrevehetően a detektorok paramétereit.

Ismeretes [15, 32, 33, 34], hogy a félvezető anyagoknál alfa, béta, gamma, termikus és gyorsneutron sugárzás hatására a kristályrácsban változások mennek

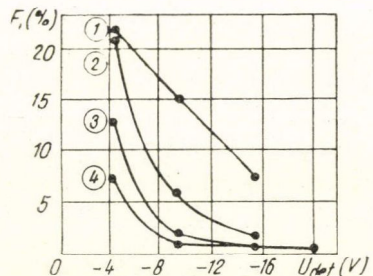


végbe. A változások oka szórás, vagy magreakció a félvezetőanyagban, melynek következtében ott különféle rácshibák lépnek fel. A rácshibák egyik legjellegzetesebb típusa az, amikor a helyéről kilökött atom a kristályrács egy más pontjába kerül. Ekkor egyidejűleg egy rácsközi (intersticiális), felesleges atom és egy hiány (vacancia) lép fel. Ez arra vezet, hogy új akceptor és donornívók jönnek létre, csapdák és rekombinációs centrumok keletkeznek. A leírt jelenségek megváltoztatják a besugárzott szilícium fajlagos ellenállását és a kisebbségi töltéshordozók élettartamát, ez pedig a töltött részek detektálásának viszonyait.

A leírt jelenségek közül elsősorban a kisebbségi töltéshordozók élettartamának nagyfokú csökkenése befolyásolja a detektorok paramétereit. A detektorok visszáraama megnövekszik. A töltéshordozók élettartam csökkenése nem egyenletes a kristály egész térfogatában: ez több (általában két) csúcs megjelenéséhez vezet. Ilyen jelenséget mutat a 6. ábra. Mint már korábban megjegyeztük, ez a felbontóképesség romlás nagyon feszültségfüggő, — a nagyobb zárófeszültségeknél a rekombináció szerepe csökken.



13. ábra. Egy 4 mm<sup>2</sup> felületű szilícium detektor feszültség-áram karakterisztikája: 1 —  $5 \times 10^{11}$  neutron/cm<sup>2</sup> gyors-neutron besugárzás előtt és után, 2, 3 —  $10^{13}$  és  $0,7 \times 10^{14}$  neutron/cm<sup>2</sup> besugárzás után



14. ábra. A detektor felbontóképesség feszültségfüggése: 4 —  $5 \times 10^{11}$  neutron/cm<sup>2</sup> gyors neutron besugárzás előtt és után, 3, 2 és 1 —  $3 \times 10^{12}$ ,  $7 \times 10^{12}$  és  $2,6 \times 10^{13}$  neutron/cm<sup>2</sup> besugárzás után

Barancov és Kazarinov [34] a szilíciumdetektorokat neutronok és hasadási részek bombázó hatásának tették ki. 15 MeV-es neutronokkal bombázott 4 mm<sup>2</sup> felületű detektor feszültség-áram függését a neutronfluenstől a 13. ábra, a felbontóképesség és a jelamplitúdó függést pedig a 14. és 15. ábra mutatja be. Vizsgálataik szerint a termikus neutronok még  $5 \cdot 10^{14}$  n/cm<sup>2</sup> nagyságrendű fluens esetén sem váltottak ki jelentős hatást. Ennek magyarázata abban rejlik, hogy amíg a gyors neutronok szórás útján jelentékeny energiát tudnak átadni a kristályrácsnak, addig a termikus neutronok fő energia átadási formája a  $\gamma$ -sugárzással járó neutronbefogás, melynél az elmozduló atom által a kristályrácsnak átadott energia lényegesen kisebb lesz.

A fenti szerzőknek a hasadási részekkel kapott eredményeit a 16. ábra mutatja. Láthatjuk, hogy a hasadási részek behatására a félvezető detektorok kb. 2 nagyságrenddel érzékenyebbek, mint gyorsneutronokra.

A sugárkárosodás rendszerint irreverzibilis, bár hosszabb idő alatt figyeltek meg kismértékű visszaalakulást is.

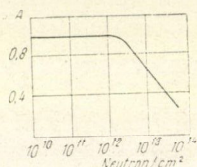


## Káros környezeti anyagok

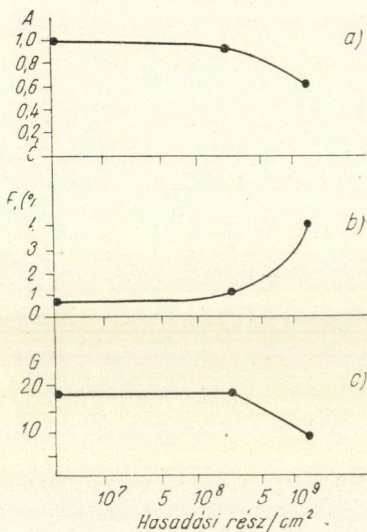
A félvezető detektorok érzékenyek mindazokra az anyagokra, melyek a szilíciumot vagy az aranyat kémiaiilag megtámadják. Káros hatású a nedves levegő és a szerves oldószerek gőzei. A detektorokat célszerű szárítóanyaggal (pl. szilikagéllel) együtt tárolni.

Ha a detektorokat vákuumrendszerben használjuk, akkor mellőzni kell a higannyal működő diffúziós szivattyúkat; a higanygőzök az aranyat megtámadják. Olajdiffúziós szivattyúnál folyékony nitrogén vagy folyékony levegős kifagyasztást kell alkalmazni.

A diffúziós technikával készült detektorok általában lényegesen kevésbé érzékenyek a leírt behatásokra, mint a felületi záróréteges detektorok.



15. ábra. Az  $\alpha$ -részecskék által kiváltott impulzusok amplitúdójának függése a gyorsneutron fluxustól.  $U_{\text{det}} = 15 \text{ V}$ .



16. ábra. Egy félvezető detektor jellemzőinek változása hasadási részekkel történt besugárzás hatására.  
a) Impulzusamplitúdó.  
b) Felbontóképesség.  
c) Csúcs-völgy arány.

## Fény

A félvezető anyagok erősen elnyelik azokat a fénykvantumokat, melyek energiája nagyobb, mint az adott anyag tiltott sávjának szélessége. Az elnyelés töltéshordozó generációt vált ki; a detektor visszarama és zaja megnő. Ezért a detektorokat sötétben kell használni.

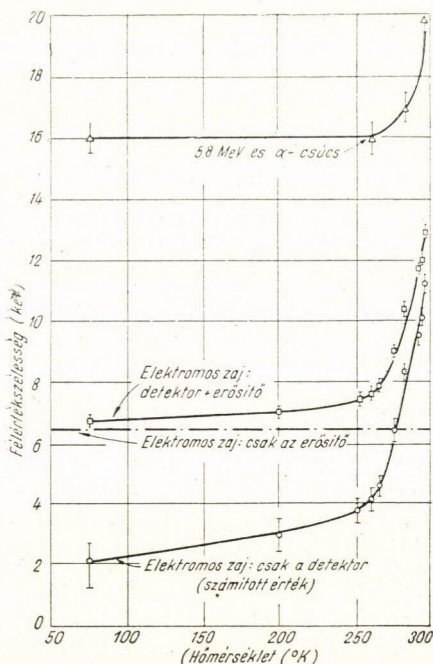
A vastag érzéketlen réteggel rendelkező diffúziós detektorok fényérzékenysége lényegesen kisebb, mint a felületi záróréteges számlálóké.

Tapasztalatok szerint a maximális zárófeszültséget csak sötétben célszerű a detektorra rákapcsolni. Egyes detektorok intenzív megvilágítás esetén időlegesen elektromosan letörnek a megengedett feszültségnél, rendszerint csak néhány nap múlva regenerálódnak.

## Hőmérséklet

A hőmérséklet elsősorban a detektorok visszaramát s ezen keresztül a felbontóképességüket befolyásolja. Félvezető anyagokban a termikus ionizáció arányos  $\exp(-\Delta E/2kT)$ -vel, ahol  $\Delta E$  — a tiltott sáv szélessége,  $k$  — a Boltzmann állandó és  $T$  — az abszolút hőmérséklet.





17. ábra. Egy 40 mm<sup>2</sup> felületű szilícium detektor energiafelbontóképességének és zajának hőmérsékletfüggése

A szilíciumkarbid számlálók a sugárátalomra is kevésbé érzékenyek, mint a szilíciumdetektorok.

### Vákuum

Egyes detektorok nagyvákuumban elvesztik kedvező tulajdonságaikat, zajuk megnő, felbontóképességük romlik [9]. Ennek oka még nem tisztázódott. Egyes detektor katalógusok (pl. Nuclear Enterprises (G. B.) Ltd, 1963. szeptember) megadják, hogy mely típusok alkalmasak vákuumban történő méréshez.

### Mechanikus hatások

A detektorok megfelelő tokozás esetén ütésre, rázkódásra stb. nagyon kevésbé érzékenyek. Ezzel is magyarázható, hogy sikeresen alkalmazhatók a világűr sugárzási viszonyainak tanulmányozására [37].

### Mágneses tér

A félvezető detektorok a zárórétegben levő nagy elektromos térerősség, kis mechanikus méretek miatt több ezer gauss erősségű mágneses térben is jól működnek. Ez a tulajdonság mágneses spektrométerekben, mágneses teret is alkalmazó gyorsítóberendezéseknél nagyon kedvező.

A fentiekből következik, hogy a hőmérséklet emelkedésével rohamosan nő a termikus zaj a detektorokban. Kis tiltott sáv szélességű anyagoknál, mint a germániumnál éppen emiatt a hatás miatt van szükség 77 °K körüli működési hőmérsékletre. A nagyobb tiltott sáv szélességű szilícium számlálók szobahőmérsékleten is jól működnek, de gyakran alkalmazzák őket a kedvezőbb -20 °C-0 °C hőmérsékletre lehűtve is. Walter, Dabbs és Roberts azt találták [35], hogy szobahőmérsékletre -20 °C-ra lehűtve a szilícium detektort, annak visszarama 2 nagyságrendet csökkent. Szélesebb hőmérséklettartományban végzett vizsgálatuk eredményét mutatja a 17. ábra.

A szilícium detektorok működési hőmérséklete alig, vagy egyáltalán nem haladja meg a szobahőmérsékletet. Magasabb hőmérsékleteken (pl. egyes reaktorok belsejében) folyó mérésekhez alkalmas a SiC detektor [36]. A Babcock és Chang által leírt szilíciumkarbid számláló [36] alkalmas töltött részek detektálására egészen 800 °C-ig. Ezt az teszi lehetővé, hogy a SiC tiltott sávjának szélessége 1,4 eV.



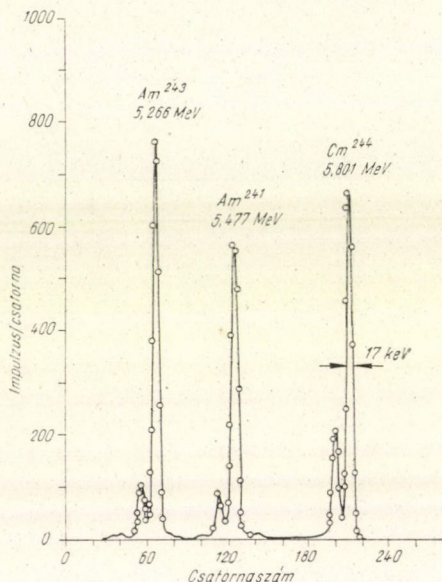
## V. Alkalmazás

## V. 1. Alfa-sugárzás spektrometriája

E folyóiratban Fényes és Mahunka már részletesen beszámoltak az  $\alpha$ -részek spektrometriájának kérdéseiről és egy általuk megépített Si — félvezető  $\alpha$ -spektrométert le is írtak [38]. Az általuk elért legjobb felbontóképesség egy RCA Victor Company által szállított 5 mm<sup>2</sup>-es felületű detektorral 6 MeV-es  $\alpha$ -részekre 0,73%. Mi a saját készítésű felületi záróréteges detektorral 10 mm<sup>2</sup>-es detektorfelületnél 0,9%-os felbontást értünk el [11]. A kihasznált detektorfelület mindkét esetben a teljes felületnek csak a fele volt.

Az irodalomban közölt legjobb felbontóképesség az előbbi adatokat lényegesen felülmúlja. Így például Walter és munkatársai [34] által leírt félvezető detektor felbontóképessége szobahőmérsékleten 13 keV (0,22%), 77° K-nél pedig 7 keV (0,12%) *Blankenship* és *Borkowski* [39] 1 cm<sup>2</sup> felületű detektorral 5,8 MeV-es  $\alpha$ -részeknél 17 keV-es (0,3%) felbontóképességet értek el. Az általuk felvett Am<sup>241</sup>, Am<sup>243</sup> és Cm<sup>244</sup> spektrumot a 18. ábra mutatja.

Ha kis fajlagos aktivitású minták  $\alpha$ -spektrumát kell felvenni, akkor nagy detektálási felületre van szükség. Egy detektor felületének néhány cm<sup>2</sup>-nél nagyobbra való elkészítésének technológiai és a növekvő kapacitás miatt elvi akadályai vannak. Megoldást jelent a mozaik detektor-rendszer. Ilyen összeállítást írnak le *Roman*, *Chwaszczewska* és *Kuchcinski* [15]. 180 mm<sup>2</sup> felületnél 3,3%-os felbontást értek el. Későbbiekben 7 külön előerősítő bemenőfokozatot alkalmazva közel 10 cm<sup>2</sup>-es felületnél kaptak hasonló felbontóképességet [40]. Ezt az eszközt a vizeletben levő  $\alpha$ -aktivitás elemzésére használják [41]. A kis fajlagos aktivitású anyagból vastag forrást készítve a mérési idő csökkenthető. Ilyen vastag forrással felvett impulzusamplitúdó spektrumot mutat a 19. ábra.



18. ábra. Egy 1 cm<sup>2</sup> felületű, felületi záróréteges szilícium detektorral felvett Am<sup>241</sup>, Am<sup>243</sup> és Cm<sup>244</sup> impulzus-amplitúdó spektrum

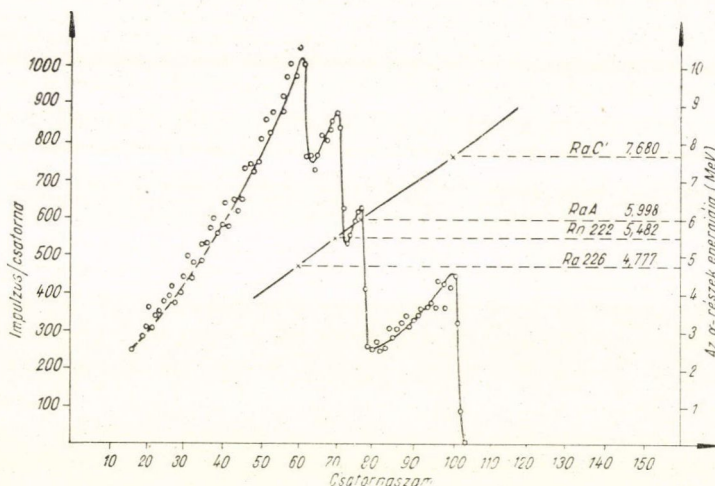
## V. 2. Töltött részek spektrometriája magreakciók vizsgálatánál

A félvezető detektorokat kis tömegük és ablakvastagságuk, valamint kitűnő felbontóképességük nagyon alkalmassá teszik a magreakcióknál keletkező, szóródó töltött részek vizsgálatára. Különös előnyt jelent az, hogy a különböző fajlagos ionizációjú, de azonos energiájú részek azonos impulzusamplitúdót adnak. *Halbert* [42] méréseket végzett N<sup>14</sup> ionokkal és azt találta, hogy 26 MeV-es ionenergiáig az ionizációs defektus kisebb, mint 0,3 MeV. Hasonlóan a 20–35 MeV közötti



$\alpha$ -rész energiáknál a kapott impulzus és az  $\alpha$ -részecske energiája közötti összefüggés 1%-on belül lineáris volt.

Cederlund, Horn és Scolnick [43] összehasonlították a 14 MeV-es  $T(d, n)\alpha$  neutronok standardizációjánál korábban használatos gáztöltésű proporcionális számlálót és az általuk használt félvezető detektorokat. A félvezető detektorok következő előnyeit állapítják meg:



19. ábra. Rádiumot és vele egyensúlyban levő leányelemeket tartalmazó vizeletminta  $\alpha$ -spektruma, vastag forrással felvéve. A minta teljes specifikus aktivitása  $3,7 \times 10^{-11}$  C/mg. Mérési idő 2 óra

1. A kis méret és tömeg biztosítja, hogy kevés neutron szóródjon a számlálón.
2. Gyors működés. Ez csökkenti a holtidőkorrekciót nagy számlálási sebességeknél, lehetővé teszi a repülési idő-technika felhasználását.
3. Időbeli stabilitás.
4. Könnyű kezelhetőség, hosszú élettartam.
5. Könnyen változtatható az érzékeny réteg mélysége.

A gáztöltésű proporcionális számláló hátrányai:

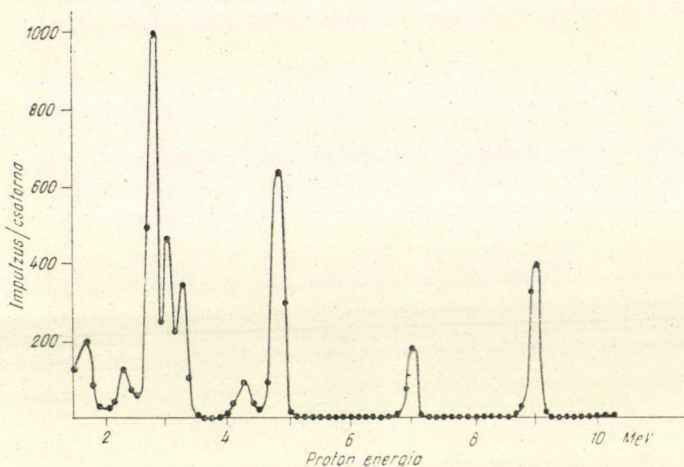
1. Viszonylag nagy méret és súly.
2. A vákuumrendszer, a gáztisztító és a Mylar ablak nagyon kényesek.
3. Állandó gáztisztító rendszer szükséges.
4. Nehéz változtatni az érzékeny réteg mélységét.

Az általuk félvezető detektorral felvett  $\alpha$ -spektrum hasonló a gáztöltésű proporcionális számlálóval mérthez, ami azt jelenti, hogy a fenti előnyök mellett a félvezető detektor azonos spektrális eredményeket biztosít.

Protonok energiaeloszlását vizsgálta Hrehuss [44] a  $B^{10}(d, p)B^{11}$  reakcióban. Egy általa felvett spektrumot mutatunk be a 20. ábrán. Látható, hogy az egyes protoncsúcsok jól elkülönülnek egymástól. Vékonyabb target alkalmazása esetén a csúcsok még jobban különválnának, a mérésnél azonban erre nem volt szükség.



A félvezető detektorok nemcsak a töltött részek teljes energiájának megmérésére, hanem a sugárzás  $dE/dx$  értékének vizsgálatára is alkalmasak. Ilyen detektort több szerző is leír [18, 45, 46]. A vékony (0,05 mm),  $dE/dx$  értéket mérő szilícium detektor a legtöbb esetben sikerrel helyettesítheti a korábban használt gáztöltésű  $dE/dx$  proporcionális számlálókat.



20. ábra. Protonok energiaeloszlása a  $B^{10}(d, p) B^{11}$  magreakcióban. A vizsgált magreakció mellett, szennyeződések miatt, fellépnek a  $C^{12}(d, p) C^{13}$  és a  $D(d, p) T$  magreakciók is

### V. 3. Hasadási részek vizsgálata

A félvezető detektorok kis ablakvastagságúak, nagyfokú linearitásuk következtében nagyon alkalmasak hasadási részek mérésére [24, 47]. A hasadási részek nagy ionizációs sűrűséget eredményeznek a szilíciumban, ez az első időpillanatokban fokozott rekombinációhoz vezet. A rekombináció következtében a detektoron megjelenő töltés az eredetileg keletkezettől kevesebb, ez mint energia defektus jelentkezik. Fokozott jelentősége van a detektor holtrétegének is, mert a hasadási részek fajlagos energialeadása pályájuk elején a legnagyobb.

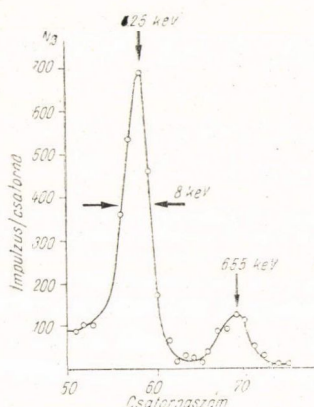
Colard és Gal [27] összehasonlították a gáztöltésű ionizációs kamrában és a félvezető detektor zárórétegében keletkező ionizációs defektust. Azt találták, hogy mindkét detektorban könnyű részek esetén a közepes energiahiány 5 MeV, nehéz részeknél pedig 6,5 MeV. Meg kell jegyezni, hogy ha alacsonyabb fajlagos ellenállású szilíciumot használunk, akkor abban — a nagyobb elektromos térerősség miatt — az ionizációs defektus kisebb lesz.

Vékony (20–50  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ -es) hasadóanyag réteg használatánál a nehéz és könnyű részek élesen elkülönülnek [48, 49], de vastagabb (100  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) réteg is jól felhasználható számlálásra [50].

### V. 4. Béta sugárzás mérése

McKenzie és Ewan [51] 12 000 ohmcm-es fajlagos ellenállású,  $p$ -típusú anyagból diffúziós technikával készült detektort monoenergetikus elektronok mérésére alkal-





21. ábra. A  $\text{Cs}^{137}$  konverziós elektronjainak energiaspektruma  $200^\circ\text{K}$ -ra hűtött szilícium detektorral felvéve. A detektor litium-ion drifttel készült

alkalmasak. A germániumnak nagyobb rendszáma miatt nemcsak a fotoelektromos abszorpciója haladja meg a szilíciumét, hanem a Compton-szórása is nagyobb. A szilícium és germánium részleges és teljes abszorpciós hatáskeresztmetszetét a 22. és 23. ábra mutatja [15].

A germánium detektorok csak alacsony hőmérsékleten működnek kielégítően, ezért ezeket a  $\gamma$ -sugárzás mérésénél legtöbbször csak spektroszkópiai célra használják. Ahol a  $\gamma$ -kvantumok energiáját nem kell megmérni, hanem csak az intenzitás megállapítására van szükség, ott egyszerűbb használhatóságuk miatt gyakran célravezetőbb a szilícium detektorok alkalmazása.

$\gamma$ - és  $\beta$ -sugárzás mérésére a diffúzióval készült detektorok előnyösebbek, mint a felületi zárórétegesek. Ennek oka egyrészt az, hogy a diffúzióval készült detektorok külső hatásokra ellenállóbbak és azok tokozása könnyebben megoldható. Másik szempont az, hogy a diffúziós módszer szükségessé teszi a detektorok többszáz fokra való melegítését és így megoldható a nagy fajlagos ellenállású szilíciumhoz kapcsolódó zajmentes kontaktus elkészítése is.

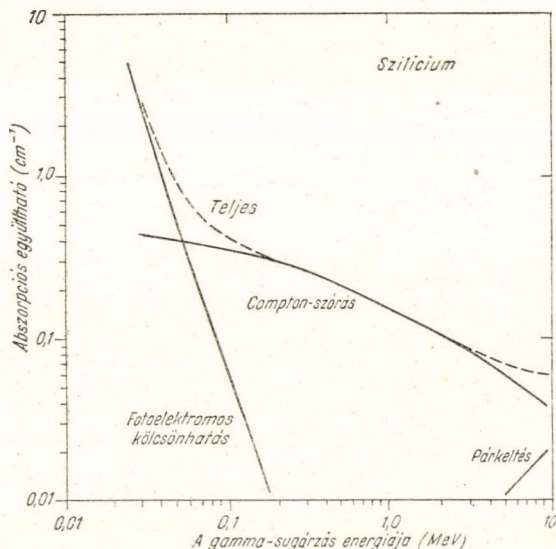
maztak. Azt találták, hogy ha a záróréteg mélysége a 350 keV-es elektron hatótávolsággal egyező, akkor 1200 keV-es energiáig a teljes abszorpció is fellép, de a legfőbb elektron csak a záróréteg vastagságának megfelelő minimális energiát adja le a zárórétegben.

A litium drifttel előállított  $n$ - $i$ - $p$  detektorokat Matveev és Rivkin [52] sikerrel alkalmazták a  $\text{Cs}^{137}$  konverziós elektronjainak mérésére. Az általuk  $200^\circ\text{K}$ -nél felvett spektrumot a 21. ábrán mutatjuk be.

Berényi és Fényes [53] a szilícium detektornak a mágneses  $\beta$ -spektrométerben történő felhasználását írják le. Az általában használatos GM csövekkel szemben előny az energiadiszkrimináció lehetősége, a szcintillációs számlálókkal szemben pedig a mágneses tér iránti érzéketlenség.

### V. 5. Gamma-sugárzás mérése

Gamma-sugárzás mérésére nagyobb számlálási hatásfokuk miatt elsősorban a germánium detektorok



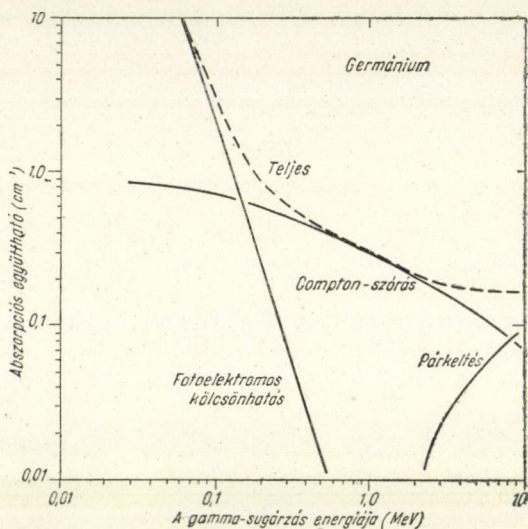
22. ábra. A szilícium részleges és teljes  $\gamma$ -abszorpciós hatáskeresztmetszetének energiafüggése.



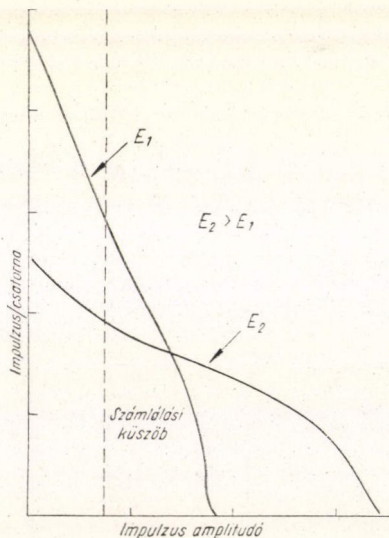
A felületi záróréteges detektoroknál használt — szobahőmérsékleten végzett — kontaktuskészítési módok egyike sem ad zajmentes kontaktust. Ezek a módszerek (fémréteg párolás, ezüstpaszta ragasztás és nikkelezés) olyan kontaktust eredményeznek, melyek a legtöbb esetben nagy, diszkrét áramimpulzusokat adnak. Az áramimpulzusok hasonlóak az ionizáló sugárzások által keltett impulzusokhoz. A legrosszabb eseteket kivéve ezek az impulzusok nem okoznak felbontóképesség romlást, mert a hasznos jelekkel nem egyidejűleg lépnek fel és megfelelő elektronikus fokozattal leválaszthatók. Ott, ahol a mérés természetéből következően kis diszkriminációs küszöböt kell választani, a fenti, néha 200 keV ekvivalens zajimpulzusok zavaróak lehetnek.

Szilíciumdetektorok hordozható  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$ -sugármérőben történő felhasználását írják le Moncaster és munkatársai [16]. Ők 10 000 ohmcm-es  $p$ -típusú alapanyagból készült, 2,27 cm<sup>2</sup>-es felületű szilíciumdetektort alkalmaztak. A detektorfeszültséget 50 V-ra választva a záróréteg szélessége mintegy 0,3 mm-t ért el.

Szilícium számlálókban a  $\gamma$ -sugárzásnál általában a Compton kölcsönhatás dominál. Ilyenkor monoenergetikus  $\gamma$ -sugarak hatására a szekunder elektronok energiaspektruma csaknem folyamatos nulla energiától a  $\gamma$ -kvantum energiájáig. A szekunder elektronok energiájuk egy részét már a zárórétegen kívül adják le. A nem teljes energiaátadás a nagyobb energiájú  $\gamma$ -sugaraknál fokozódik, ez okozza a 24. ábrán látható, háromszög alakú differenciális amplitúdó eloszlást. A különböző energiájú  $\gamma$ -sugarakra a készülék abszolút és viszonylagos



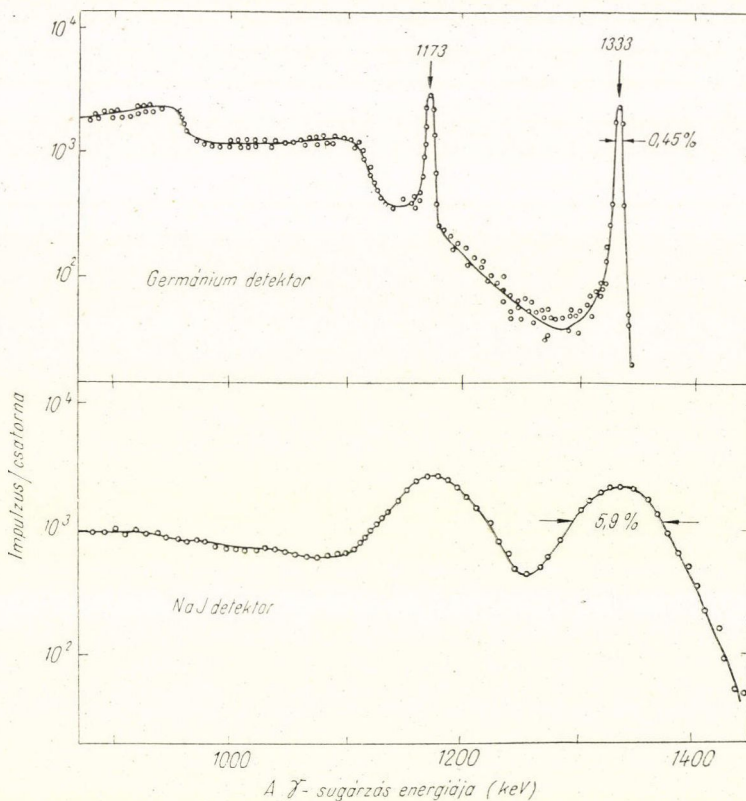
23. ábra. A germánium részleges és teljes  $\gamma$ -abszorpció hatáskeresztmetszetének energafüggése



24. ábra. Záróréteges szilícium detektor impulzus-amplitúdó eloszlása két különböző energiájú  $\gamma$ -sugárzásnál.

érzékenységét a diszkriminációs küszöb beállításával lehet változtatni. A fent említett szerzők ezt a kérdést részletesen nem vizsgálták meg, de Jones kimutatta [54], hogy a  $p-n$  átmenettel működő,  $\gamma$ -sugárzás dózisát mérő eszközt a diszkriminációs küszöb megfelelő kiválasztásával közel energiafüggetlenné lehet tenni.

A Moncaster és munkatársai által készített eszköz érzékenysége gyakorlatilag irányfüggetlen volt. 70 keV-os diszkriminációs küszöbnél, a Co-60 sugárforrás 1 mr/óra dózisintenzitásánál a készülék 1 impulzust adott másodpercenként. A készülék felső méréshatára 1000 mr/óra volt. A  $p-n$  detektor zárófeszültségét és



25. ábra. A  $\text{Co}^{60}$   $\gamma$ -sugárzásának spektruma a nagyenergiás tartományban.  
 a) Germániumból, litiumdrift technológiával készített detektorral felvéve  
 b)  $76 \times 76$  mm-es NaJ(Tl) kristállyal felvéve

takarólemezt változtatni lehetett és így a mindössze 1,2 kg súlyú készülék  $\alpha$  és  $\beta$ -sugárzás mérésére is alkalmas volt. A műszert logaritmikus ratemeteren kívül akusztikus indikátorral is felszerelték.

Nagy fajlagos ellenállású szilícium alapanyagból készült detektorokkal folytak kísérletek a  $\gamma$ -sugárzás spektrumának felvételére [52], azonban a mintegy 30-szor



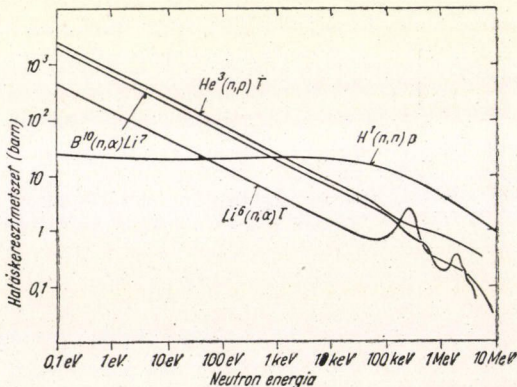
nagyobb fotoelektromos abszorpciójú germánium spektrométerekkel lényegesen jobb eredményt lehetett elérni. Ilyen spektrométert írnak le *Tavendale és Ewan* [55]. A spektrométer 10 ohm-cm-es fajlagos ellenállású germánium egykristályból, lítium-drift módszerrel készült. Az érzékeny térfogat átmérője 18 mm, vastagsága 8 mm volt. Folyékony nitrogén hőmérsékletén üzemeltették, ilyen hőmérsékleten 450 V-os feszültségnél a detektor visszárama  $10^{-10}$  A volt. A detektor felbontóképessége 122 keV-es gamma energiánál 4,5 KeV, 1,33 MeV-nél pedig 6 KeV. Ezzel az eszközzel felvett Co-60 forrás  $\gamma$ -spektrumát a 25. ábra mutatja. Összehasonlításként ugyanazon az ábrán feltüntetjük a szerzők által  $76 \times 76$  mm-es NaJ(Tl) kristállyal felvett Co-60 spektrumot. A szcintillációs spektrométer felbontóképessége 1,33 MeV-nél 5,9% (kb. 80 keV) volt. A leírt germánium kristály fotocsúcs határfoka 1,33 MeV-es  $\gamma$ -energiánál 0,2%, 661 KeV-nél 0,7%, a  $76 \times 76$  mm-es NaJ(Tl) kristályénál 2 nagyságrenddel kisebb.

A fentiek alapján láthatjuk, hogy a germánium  $\gamma$ -spektrométerek általános használatra nem alkalmasak, mert csak erősen hűtve működnek, határfokuk kicsi. Ott, ahol a felbontóképesség javítása elengedhetetlen, ez az eszköz jól alkalmazható. Néhány esetben kiszoríthatja, vagy kiegészítheti a mágneses spektrométereket. Valószínűnek látszik, hogy a gamma spektrometriának ez módszere, melyről az első közlemények mindössze 2 éve jelentek meg, további jelentős eredményeket fog elérni.

Mint érdekességet meg kell említeni a kis tehetetlenségű szilícium detektorok felhasználását pulzált röntgensugárzás mérésére [56].

#### V. 6. Neutronok mérése

Neutronok mérésére a félvezető detektorok rendszerint közvetlenül nem alkalmasak. Szükséges, hogy a neutronok segítségével töltött részeket keltsünk és ezeket a töltött részeket mérjük a félvezető detektorral. Felhasználhatók a szokásos magreakciók: termikus neutronok mérésére a  $\text{Li}^6(n, \alpha)\text{T}$  és a  $\text{B}^{10}(n, \alpha)\text{Li}^7$ , a gyorsneutronok mérésére, ill. spektrometriájára a  $\text{H}(n, n')\text{p}$ , a  $\text{Li}^6(n, \alpha)\text{T}$  és a  $\text{He}^3(n, p)\text{T}$ . A 26. ábra a fenti magreakciók hatáskeresztmetszetét mutatja be a neutronenergia függvényében [15]. Termikus és gyorsneutronok mérésére egyaránt alkalmasak a hasadóanyag-gal kombinált félvezető detektorok. Az  $\text{U}^{233}$ ,  $\text{U}^{235}$  és  $\text{Pu}^{239}$  termikus neutronok hatására is hasad, míg az  $\text{U}^{234}$  hasadási küszöbe 0,25 MeV, a  $\text{Np}^{237}$  0,3 MeV, az  $\text{U}^{236}$  0,7 MeV, az  $\text{U}^{238}$  1,3 MeV és a  $\text{Th}^{232}$  1,4 MeV feletti energiájú neutronok hatására hasad [57].



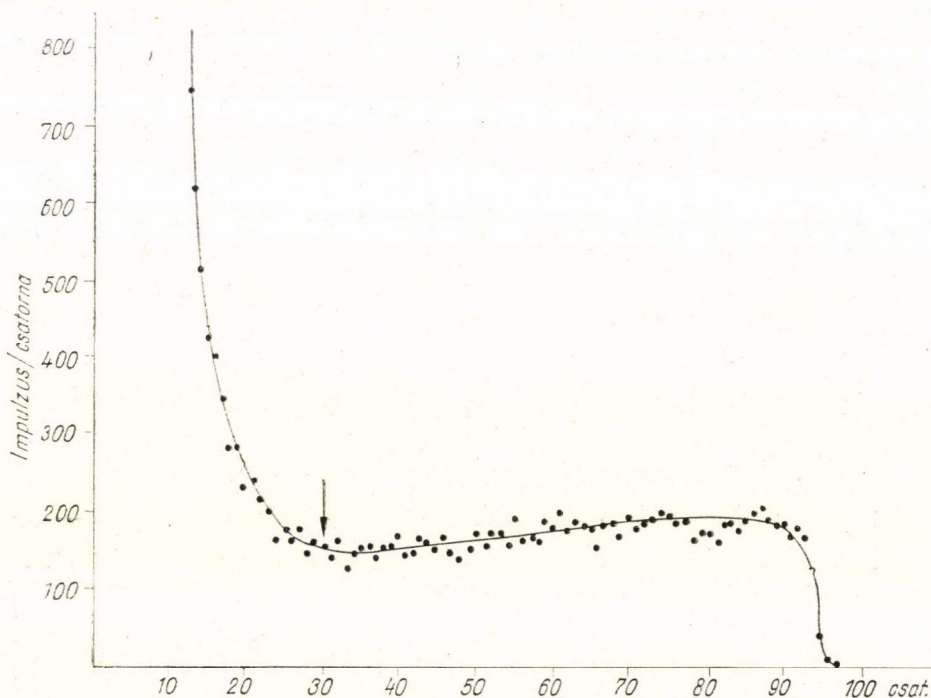
26. ábra. Néhány, neutronok mérésére szolgáló magreakció hatáskeresztmetszetének energiafüggése

$\text{B}^{10}(n, \alpha)\text{Li}^7$  reakciót használt fel *Sakai* [33] termikus neutronok mérésére. E magreakció termikus neutron hatáskeresztmetszete körülbelül 4000 barn. A  $\text{B}^{10}$



réteget vákuumban párolják a detektor felületére, vagy egy külön fémlapra, melyet később helyeznek el közel a detektor felületéhez. A félvezető detektor a keletkező  $\alpha$ -részeket és  $\text{Li}^7$  magokat számlálja. A reakcióban a  $\text{Li}^7$  gerjesztett állapota miatt 4 különböző energiájú részecske keletkezik, melyek közül az 1,77 MeV-es  $\alpha$ -részek a legnagyobb energiájúak.

A  $\text{Li}^6(n, \alpha)T$  reakció kisebb hatáskeresztmetszetű, de a keletkezett részek energiája közel egyenlő és nagyobb, mint az előbbi reakció esetén, ezért vastagabb  $\text{Li}^6$  réteget lehet használni. Egy vastag,  $\text{Li}^6$  tartalmú rétegből kilépő töltött részecske spektrumot mutat a 27. ábra [58].



27. ábra. Termikus neutronokkal bombázott vastag  $\text{Li}^6$  rétegből kilépő  $\alpha$  és  $T$ -részek impulzus-amplitúdó eloszlása. A számlálási hatások a nyíllal megjelölt integrál diszkriminációs küszöbnél 0,3%.

A leírt termikus neutron számlálók kalibrálás után alkalmasak a termikus neutronfluxus mérésére.

A  $\text{Li}^6(n, \alpha)T$  magreakciónál a reakciótermékek összes energiája 4,78 MeV-el nagyobb, mint a reakciót kiváltó neutron energiája. Ha a két, egymással ellentétes irányban kilépő reakciótermék energiáját összegezzük, akkor mód nyílik a gyors-neutronok spektrumának megmérésére [33, 59, 60, 61].

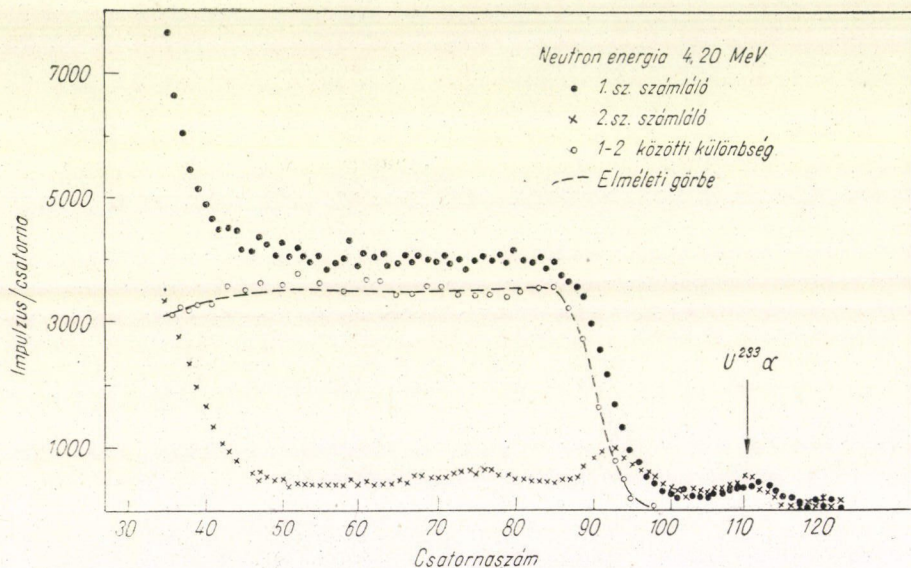
A módszer technikai megoldása céljából egy szilícium detektor felületére mintegy  $150 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  vastagságú  $\text{Li}^6\text{F}$  réteget párolnak fel vákuumban. E detektorral szemben, hozzá közel, egy másik, hasonló detektort helyeznek el. A koincidenzában kilépő  $\alpha$  és triton-részek impulzusait összegezik és az így keletkező kimenőjel ará-



nyos az  $E_n + 4,78$  MeV-es értékkel, ahol  $E_n$  — a neutronok energiája. Mérések szerint [60] a linearitás a neutronenergia függvényében kitűnő. A hatásfok 2 MeV-es neutronokra  $10^{-6}$  nagyságrendű, az energiafelbontás mintegy 300 KeV. A kis hatásfok miatt ezeket a spektrométereket csak nagy neutron fluxusoknál lehet használni, főleg ott, ahol a pulzált neutrongenerátorral kombinált repülési módszer nem alkalmazható. Ha a két detektor összegimpulzusát a detektorok külön-külön jeleinek koincidenáciájával kapuzzuk, akkor a neutronok által a szilíciumban kiváltott zavaró reakciók hatását csökkenthetjük. Ez a csökkentés mintegy 8 MeV-es neutronenergiaig hatásos, nagyobb energiáknál jelentős lesz az egyik számlálóból a másikba is átjutó, koincidenáciával kiszűrhetetlen proton és  $\alpha$ -hátér.

Hasonló elven működő,  $\text{He}^3$  gázt tartalmazó gyorsneutron spektrométert ír le Dearnaley és Ferguson [62]. Ebben a  $\text{He}^3(n, p)\text{H}^3$  ( $Q=0,76$  MeV) magreakciót használják fel.

A protonmegelőkésen alapuló módszerrel elsősorban az időben változatlan energiaspektrumú neutronfluxus viszonylagos értékét szokás mérni. Fel lehet azon-



28. ábra. Protonmegelőkéses ikerdetektorral felvett neutronspektrum. A polietilén réteg vastagsága  $1,1 \text{ mg/cm}^2$ . A monoenergetikus neutronok energiája 4,2 MeV

ban az elvet használni neutronspektroszkópiára is. Ha a neutronok monoenergetikusok, akkor egy, a protonok hatótávolságához képest vékony hidrogén tartalmú fóliából kilépő protonok energiaspektruma — teljes térszögben — zérustól a neutron-energiáig terjed. Az adott tartományon belül bármely proton energia egyformán valószínű.

A szilíciumban keletkező  $\alpha$  és  $p$ -részek zavaró hatását csökkenteni lehet az ún. iker-spektrométerek alkalmazásával [62]. Egy szilíciumkristályra két félkör alakú detektor felületet készítenek, közvetlenül egymás mellé. A felületek közül az egyikre



szerves, hidrogéntartalmú filmet visznek fel. A két — egyébként azonos detektorral felvett — spektrum különbsége adja a protonok energiaeloszlását (28. ábra). A neutronok abszolút energiájának mérését úgy oldották meg, hogy a detektorok felületére mikropipettával kevés  $U^{233}$  izotópot vittek fel. Ennek ismert energiájú  $\alpha$ -sugárzása energia hitelesítésre alkalmas.

A hasadóanyaggal kombinált félvezető detektorok alkalmasak termikus [63, 64] és gyorsneutronok [57] abszolút fluxusának mérésére is. A hasadóanyagok

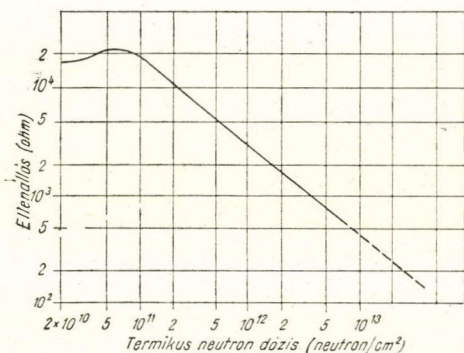
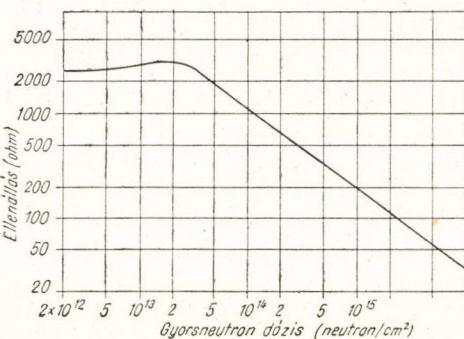
alkalmazása különösen nagy intenzitású  $\gamma$ -sugárzási térben történő neutronmérésnél indokolt.

A hasadásnál felszabaduló töltött részek energiája más magreakciókhoz viszonyítva igen nagy, a hatótávolságuk pedig kicsi. Ez 10 MeV feletti diszkriminációs szint és vékony záróréteg alkalmazását teszi lehetővé s így a rendszernek a  $\gamma$ -sugárzás iránti érzékenysége minimális.

A hasadóanyagokkal kombinált neutron számlálók abszolút érzékenységének megmérése a tesztelhető, hogy a hasadóanyagok  $\alpha$ -sugárzók. A fajlagos  $\alpha$ -sugárzás ismert, vagy megmérhető, így mód nyílik a detektor által mért  $\alpha$ -számlálási sebesség és a hasadóanyag hatáskeresztmetszetéből az abszolút hatásfok kiszámítására [64].

Több, különböző küszöbenergiájú hasadóanyag felhasználásával megoldható a reaktorok belsejében levő gyorsneutron-spektrum közelítő meghatározása [57].

Nagyon nagy ( $10^{13}$  n/cm<sup>2</sup>sec-es) neutronfluxusok mérésénél a hasadóanyag réteget és a félvezető detektort egy több méter hosszú, evakuált cső két végén helyezik el [47]. Így nem kell a



29. ábra. Félvezető hasáb ellenállása különböző gyors és termikus neutron dózis után

félvezető detektort a reaktorzónába helyezni, ami a zavaró sugárzások diszkriminációja, és a sugárkárosodás kiküszöbölése szempontjából döntő jelentőségű.

A félvezető anyagok sugárkárosodását is fel lehet használni a sugárzás dozimetriájára [65]. Ha egy félvezető kristályt neutronokkal bombázunk, akkor annak fajlagos ellenállása megváltozik. Ez a módszer közvetlenül alkalmas gyorsneutronok dózisának mérésére. Termikus neutronok dózisát konverterréteg ( $B^{10}$ ,  $Li^6$ ) segítségével méri.

Egy félvezető hasáb ellenállásának különböző neutron dózisok hatására történő változását mutatja be a 29. ábra. A kezdeti, nem lineáris szakaszt előbesugárzással lehet kiküszöbölni.



Hasonlóan fel lehet használni neutrontozimetria célra speciális módon készített szilícium diódákat [66]. A diódák átmérője 3 mm, a bázisvastagság mintegy 1,5 mm. A diódák nyitóirányú ellenállása kb. 0,2%-ot változik 1 rad 0,5–4 MeV közötti energiájú gyorsneutron besugárzásra. A legkisebb mérhető gyorsneutron dózis ezzel a módszerrel 0,5 rad (kb.  $3 \cdot 10^8$  n/cm<sup>2</sup>).

## 2. TÁBLÁZAT

*A közel saját vezetésű szilícium és germánium néhány fizikai tulajdonságai [15, 32]*

Megnevezés	Szilícium	Germánium
Hely a periódusos rendszerben .....	IV. b. csoport	IV. b. csoport
Rendszám .....	14	32
Atomsúly .....	28,09	72,60
Stabil izotóp tömegszámai .....	28, 29, 30	70, 72, 73, 74, 76
Kristály forma .....	Lapcentrált kockarács (gyémánt típus)	Lapcentrált kockarács (gyémánt típus)
Rácsállandó .....	5,42 Å	5,657 Å
Atomszám cm <sup>3</sup> -ként .....	$4,96 \times 10^{22}$	$4,41 \times 10^{22}$
Fajsúly .....	2,33 g/cm <sup>3</sup>	5,33 g/cm <sup>3</sup>
Olvadáspont .....	1420 °C	936 °C
Forráspont .....	2600 °C	2825 °C
Lineáris hőtágulási együttható .....	$4,2 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$	$6,1 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$
Hővezető képesség .....	0,20 cal/cmsec °C	0,14 cal/cmsec °C
Fajhő (0°–100 °C) .....	0,181 cal/g °C	0,074 cal/g °C
Dielektromos állandó .....	12	16
Tiltott sáv szélessége .....	1,10 eV	0,75 eV
Ellenállás saját vezetés esetén (300 °K)	230 000 ohmcm	47 ohmcm
Töltéshordozó koncentráció saját vezetésnél (300 °K) .....	$1,5 \times 10^{10}/\text{cm}^3$	$1 \times 10^{14}/\text{cm}^3$
Elektronok drift mozgékonyasága (300 °K) .....	1350 cm <sup>2</sup> /voltsec	3800 cm <sup>2</sup> /voltsec
Lyukak drift mozgékonyasága (300 °K)	480 cm <sup>2</sup> /voltsec	1800 cm <sup>2</sup> /voltsec
Elektronok diffúziós állandója (300 °K)	35 cm <sup>2</sup> /sec	92 cm <sup>2</sup> /sec
Lyukak diffúziós állandója (300 °K)	12,4 cm <sup>2</sup> /sec	44 cm <sup>2</sup> /sec

## IRODALOM

- [1] W. L. Brown, IRE Trans. NS-8, № 1, 2, 1961.
- [2] Fényes T., Atomki Közlemények, 3, 43 1961.
- [3] Deme S., Fizikai Szemle, 12, № 7, 1962.
- [4] R. Hofstadter, Nucleonics, 4, № 4, 2 és № 5, 29, 1949.
- [5] М. Борисов и М. Маринов, Nuclear Electronics, vol. I. 363, IAEA, Vienna, 1962.
- [6] R. J. Griffiths, C. J. Batty, P. E. Gibbons and D. C. Northrop, Nuclear Electronics, vol. I. 497, IAEA, Vienna, 1962.
- [7] J. D. Van Putten and J. C. Van der Velde, IRE Trans. NS-8, № 1, 124, 1961.
- [8] W. R. Harding, C. Hilsun, M. E. Monsacter, D. C. Northrop and O. Simpson, Nature, 187, 405, 1960.
- [9] G. Dearnaley and A. B. Whitehead, Nucl. Instr. Meth. 12, 205, 1961.
- [10] В. В. Бредель, В. Л. Мухеев, С. М. Поликанов, ОИЯИ, Д-407, Дубна, 1961.
- [11] Bíró J., Deme S., Fehér I., Puskás L., KFKI Közlemények, 10, 3, 241, 1962.
- [12] Я. Хвайцевска, С. Хвайцевски, К. Дыдовски, Nukleonika, 6, 10, 635, 1961.



- [13] J. L. Blankenship and J. C. Borkowski, IRE Trans., NS-7, 2-3, 190, 1960.
- [14] J. Chwaszczewska, M. Dakowski, W. Przyborski, M. Sowinski, A. Szechter, E. Kierzek-Pecolt, Z. Weydman, E. Zalewski, Report IBJ, № 444/1a, II, IX, Warsaw, 1963.
- [15] G. Dearnaley, D. C. Northrop: Semiconductor Counters for Nuclear Radiations. Spon Ltd., London, 1963.
- [16] M. E. Moncaster, D. C. Northrop and J. A. Raines, Nucl. Instr. Meth., 22, 157, 1963.
- [17] J. W. Mayer, N. A. Baily and H. L. Dunlap, Nuclear Electronics, vol. I., 567, IAEA, Vienna, 1962.
- [18] L. Koch, J. Messier et J. Valin, Nuclear Electronics, vol. I., 465, IAEA, Vienna, 1962.
- [19] F. S. Goulding and W. L. Hansen, Nucl. Instr. Meth., 12, 249 (1961).
- [20] P. A. Tove and K. Falk, Nucl. Instr. Meth., 12, 278, 1961.
- [21] J. L. Blankenship, C. J. Borkowski and R. J. Fox, Nuclear Electronics, vol. I., 379, IAEA, Vienna, 1962.
- [22] Я. Хвощевская, М. Даковский, А. Домбровский, М. Совинский, М. Слапа, Доклад IBJ. № 463/I. А, II, Варшава, 1963.
- [23] G. Dearnaley, IEEE Trans., NS-10, № 1, 106, 1963.
- [24] G. L. Miller and W. M. Gibson, Nuclear Electronics, vol. I., 477, IAEA, Vienna, 1962.
- [25] H. O. Funsten, IRE Trans., NS-9, № 3, 190, 1962.
- [26] I. Dunmur, G. George, E. M. Gunnersen and A. Hitchcock, Nuclear Electronics, vol. I., 501, IAEA, Vienna, 1962.
- [27] J. Colard and J. Gal, Nucl. Instr. Meth., 16, 195, 1962.
- [28] J. Roman, J. Chwaszczewska, A. Kuchcinski, Report № CLOR/I-B-IBJ-18.
- [29] Mahunka I., Lakatos T. és Fényes T., Atomki Közlemények, 5, 2. szám, 65, 1963.
- [30] B. Mainsbridge, T. W. Bonner and T. A. Rabson, Nuclear Phys. 48, 83, 1963.
- [31] R. J. Howerton, UCRL Report 5226, 1958.
- [32] У. Данлэп: Введение в физику полупроводников, Изд. Иностран. Лит., Москва, 1959.
- [33] E. Sakai, Nuclear Electronics, vol. I., 551, IAEA, Vienna, 1962.
- [34] И. А. Баранов, Н. М. Казаринов, Атомная энергия, 16, 60, 1964.
- [35] F. J. Walter, J. W. T. Dabbs and L. D. Roberts, Nuclear Electronics, vol. I., 391, IAEA Vienna, 1962.
- [36] R. v. Babcock and H. C. Chang, Neutron Dosimetry, vol. I., 613, IAEA, Vienna, 1963.
- [37] S. S. Friedland, F. P. Ziemba, R. M. Olson and H. Delyser, IRE Trans., NS-9, № 3, 391, 1962.
- [38] Fényes T. és Mahunka I., Magyar Fizikai Folyóirat, 10, 31, 1962.
- [39] J. L. Blankenship and C. J. Borkowski, IRE Trans., NS-8, № 1, 17, 1961.
- [40] J. Roman, személyes közlés.
- [41] J. Roman, J. Bilkiewicz, J. Chwaszczewska, Report CLOR/IBJ II-21, Warsaw, 1963.
- [42] M. L. Halbert, Nuclear Electronics, vol. I., 403, IAEA, Vienna, 1962.
- [43] R. Cederlund, A. Horn and M. Scolnick, Nucl. Instr. Meth., 13, 305, 1961.
- [44] Hrehuss Gy., személyes közlés.
- [45] H. E. Wegner, Nuclear Electronics, vol. I., 427, IAEA, Vienna, 1962.
- [46] T. H. Braid and J. T. Heinrich, Nuclear Electronics, vol. I., 447, IAEA, Vienna, 1962.
- [47] B. Lalović and V. Ajdačić, Nuclear Electronics, vol. I., 543, IAEA, Vienna, 1962.
- [48] Б. Бурас, М. Даковский, М. Совинский и Я. Хвощевская, ИЯИ-476/II, Варшава, 1963.
- [49] W. T. Joyner, H. W. Schmitt, J. H. Neiler and R. J. Silva, IRE Trans., NS-8, № 1, 54, 1961.
- [50] Ш. Деме и И. Фехер, Neutron Dosimetry, vol. II., 557, IAEA, Vienna, 1963.
- [51] J. M. McKenzie and G. T. Ewan, IRE Trans., NS-8, № 1, 50, 1961.
- [52] О. А. Матвеев, С. М. Рыбкин, Атомная Энергия, 16, 60, 1964.
- [53] Berényi D. és Fényes T., Atomki Közlemények, 5, 3-4. szám, 1963.
- [54] A. R. Jones, Health Physics, 8, 1, 1962.
- [55] A. J. Tavendale and G. T. Ewan, Nucl. Instr. Meth., 25, 185, 1963.
- [56] О. А. Матвеев, С. М. Рыбкин, Д. В. Тархин, Атомная Энергия, 16, 363, 1964.
- [57] D. Strominger, Neutron Dosimetry, vol. II., 385, IAEA, Vienna, 1963.
- [58] Deme S., publikálatlan mérés.
- [59] J. Bok, B. de Cosnac, J. P. Noël et R. Schuttler, Nuclear Electronics, vol. I., 451, IAEA, Vienna, 1962.
- [60] T. A. Love and R. B. Murray, IRE Trans., NS-8, № 1, 91, 1961.



- [61] *T. A. Love, R. B. Murray, J. J. Manning and H. A. Todd*, Nuclear Electronics, vol. I., 415, IAEA, Vienna, 1962.
- [62] *G. Dearnaley, A. T. G. Ferguson*, Nucleonics, 20, № 4, 84, 1962.
- [63] *Я. Хащевская, А. Шехтер*, Доклад IBJ, № 377/I-B, IX, Варшава, 1962.
- [64] *Biró J., Deme S., Fehér I. és Puskás L.*, Atomtechnikai Tájékoztató, 6, 751, (1963).
- [65] *C. A. Klein and W. D. Straub*, USA szabadalom, 3,086.117 szám, 1963.
- [66] *C. C. Gamertsfelder, P. E. Bramson, G. W. R. Endres and R. H. Wilson*, Neutron Dosimetry, vol. II., 109. IAEA, Vienna, 1963.





# SZIMMETRIA ÉS A MEGMARADÁSI TÉTELEK\*

WIGNER JENŐ

Palmer Physical Laboratory, Princeton University

## Bevezetés

Szimmetria- és invarianciamegfontolások — valamint a megmaradási tételek is — kétségtelenül már korán szerepet játszottak a fizikusok, így Galilei és Newton gondolkodásában, s valószínűleg még őelőttük is. Ezeket a megfontolásokat azonban nem tekintették különösen fontosaknak, és csak ritkán fogalmazták meg világosan. Newton egyenleteit úgy fogalmazta meg, hogy azok minden térirányt s a térben minden pontot egyenértékűnek hagytak meg. Egyenletei, amint ma mondjuk, invarianciát mutattak az elforgatásokkal és az eltolásokkal szemben. Ugyanez vonatkozik Newton gravitációs törvényére is. Nem sok értelme volt ezt a tényt hangsúlyozni és olyan természettörvények lehetőségét felvetni, amelyek alacsonyabb fokú szimmetriát mutatnak. Ami a megmaradási tételeket illeti, az energiatétel hasznos volt s a mechanikában azt már Galilei előtt ösztönösen felismerték.<sup>1</sup> Az impulzus és az impulzusmomentum megmaradásának tétele teljes általánosságában nem volt különösen hasznos, habár az utóbbi a centrális mozgás speciális esetében természetesen az egyik Kepler-törvényt adja. A századforduló körül — s még később — írott mechanikakönyvek legtöbbje nem említi az impulzusmomentum megmaradásának általános tételét.<sup>2</sup> Elég általánosan ismertnek kellett lennie, mert akik a háromtestproblémával foglalkoztak — ahol hasznosnak mutatkozott — mint magától értetődő dolgot írták fel azt. Mindazonáltal, nem szenteltek neki különös figyelmet.

Ez a helyzet — ami az egyenletek invarianciáját illeti — főként *Einstein* elméleteinek eredményeképpen gyökeresen megváltozott. *Einstein* ékesszóló világossággal mondom ki a tér szimmetriájára — a térirányok s a különböző pontok egyenértékűségére — vonatkozó követelményeket.<sup>3</sup> Ezenkívül módosított alakban visszahelyezte jogaiba a mozgó és nyugvó koordináta-rendszerek egyenértékűségét. Ami a megmaradási tételeket illeti, jelentőségük nyilvánvalóvá vált, mikor a Bohr-féle atommodell iránt támadt érdeklődés eredményeképpen az impulzusmomentum megmaradásának törvénye kiemelkedő fontosságra tett szert. Átélttem azokat az időköt s tudom, hogy e törvény s a többi megmaradási tétel iránt általános volt a bizalom. Alapos ok volt erre a bizalomra, minthogy *Hamel* már 1904-ben felismerte

\* Megjelent angolul: *Proc. Nat. Acad. Sci.* **51**, 956 (1964) és *Phys. Today* **17**, 34 (1964); oroszul: *Успехи Физических Наук* **83**, 729 (1964).

<sup>1</sup> G. Hamel *Theoretische Mechanik* (B. G. Teubner, 1912) c. könyvében (130. old.) Jordanus de Nemore-t (~1300) említi, mint aki felismerte annak lényeges vonásait, amit ma mechanikai energiának nevezünk, valamint Leonardo da Vincit, mint aki posztulálta a Perpetuum Mobile lehetlenségét.

<sup>2</sup> F. Cajori *History of Physics* (New York: Macmillan Company, 1929) c. könyve pontosan fél sort szán rá (108. old.).

<sup>3</sup> Lásd pl. félig népszerű könyvecskéjét: *Relativitätstheorie* (Braunschweig: Friedr. Vieweg und Sohn, különféle kiadások, 1916–1956).



a megmaradási törvények, valamint a tér és az idő alapvető szimmetriáinak kapcsolatát.<sup>4</sup> Noha úttörő munkája — legalábbis a fizikusok között — ismeretlen volt, a megmaradási tételek iránt oly erős volt a bizalom, mintha eredményeit mindenki ismerte és nyilvánvalónak találta volna. Ez csak újabb példa arra, hogy a fizikus intuíciója erősebb, mint a tudása.

A századforduló óta a szimmetriákkal és a megmaradási tételekkel szemben elfoglalt álláspontunk majdnem teljes fordulatot ment keresztül. Kevés olyan dolgozatot írnak napjainkban a fizika alapvető kérdéseiről, amely ne hivatkoznék invarianciakövetelményekre, és a megmaradási törvények s az invarianciaelvek kapcsolata elfogadottá vált, talán még a kelleténél általánosabban is.<sup>5</sup> Ezenkívül a szimmetria és az invariancia fogalmát új területre terjesztették ki, ahol gyökerei jóval kevésbé szorosan kapcsolódnak a közvetlen tapasztalathoz és megfigyeléshez, mint a téridő-szimmetriák klasszikus területén. Hasznos lehet ezért, ha először megtárgyaljuk a jelenségek, a természettörvények és az invarianciaelvek viszonyát egymáshoz. Ez a viszony a klasszikus invarianciaelvek — ezeket geometriai elveknek fogjuk nevezni — s az új invarianciaelvek — ezeket dinamikai elveknek nevezük majd — esetében nem teljesen azonos. Végül szeretném a szokásosnál elemibb nézőpontból áttekinteni a megmaradási tételek és az invarianciaelvek viszonyát.

### Események, természettörvények, invarianciaelvek

Ezen fogalmak viszonyának kérdése nem új; az hosszú időn át foglalkoztatta az embereket, eleinte csaknem tudat alatt. Talán nem érdektelen, ha azt most nagyobb tapasztalatunk és — azt reméljük — érettebb tudásunk fényében újra áttekintjük.

Igen absztrakt nézőpontból tekintve, a természettörvények viszonya az eseményekhez egyrészről, és a szimmetriaelvek viszonya a természettörvényekhez másrészről, nagyfokú hasonlóságot mutat. Hadd kezdjem az előbbivel, a természet-törvények és az események viszonyával.

Ha tudnánk, mi lesz valamely bolygó helye tetszőlegesen adott időpontban, nem maradna semmi, amit a fizika törvényei még mondhatnának nekünk ezen bolygó mozgásáról. Ez általánosabban is igaz: ha tudásunk a világon mindenütt és minden időben bekövetkező eseményekről teljes volna, nem volna haszna a fizika — vagy bármely más tudomány — törvényeinek. Hadd tegyem itt azt a meglehetősen nyilvánvaló megállapítást, hogy a természettörvények azért hasznosak, mert nélkülük még kevesebbet tudnánk a világról. Ha már ismernénk a bolygó helyzetét minden időben, a mozgástörvények szolgáltatna összefüggés a helykoordináták között nem volna hasznos, de azért érdekes maradna Ámulatot s talán örömet ébresztene bennünk, noha új adatokat nem szolgáltatna. Talán ha valaki ama bolygó helyére vonatkozóan eltérő adatokat tárna elénk, határozottabban tudnánk neki ellentmondani, ha a helykoordinátákra vonatkozó közlései nem állnának összhangban a bolygómozgás törvényeivel. Ez természetesen

<sup>4</sup> Engel, F., *Ges. d. Wiss. Göttingen*, 270 (1916); továbbá Hamel, G., *Z. Math. Phys.*, **50**, 1 (1904).

<sup>5</sup> Lásd a szerző cikkét: *Progr. Theoret. Phys.*, **11**, 437 (1954); lásd még Murai, Y., *Progr. Theoret. Phys.*, **11**, 441 (1954); továbbá Greenberger, D. M. újabb dolgozatát, *Ann. Phys.* **25**, 290 (1963).



feltételezi, hogy bízunk azon természettörvényekben, amelyek a bolygómozgásra vonatkoznak.

Fordítsuk most figyelmünket a szimmetria- vagy invarianciaelvek és a természettörvények viszonyára. Ha ismerünk valamely természettörvényt, mint pl. az elektrodinamika egyenleteit, ezen egyenletek invarianciatulajdonságainak ismerete nem növelné meg az egyenletek tartalmát. Érdekes maradna felismerni, hogy a korrelációk az egyenletek szerint bekövetkező események között ugyanazok, akár nyugvó, akár egyenletes mozgást végző megfigyelő szemléli azokat. Mindazonáltal, az egyenletek már maguk megadnak minden korrelációt az események között, s az egyenletek invarianciájára vonatkozó, előbb említett megjegyzés nem növeli meg ezen korrelációk számát és nem is változtatja meg tartalmukat.

Általánosabban szólva, ha ismernénk minden természettörvényt vagy a természet végső törvényét, ezen törvények invarianciatulajdonságai nem nyújtának számunkra új ismeretet. Szemlélvén azokat bizonyos öröm s talán ámulat ébredhetne bennünk, noha új összefüggéseket nem szolgáltatnak. Talán ha valaki más természettörvény javaslatával állna elő, hatásosabban tudnánk neki ellentmondani, ha a javasolt természettörvény nem állna összhangban invarianciaelvünkkel — feltéve, hogy bízunk ezen invarianciaelvben.

Nyilvánvaló, hogy az előbbi fejtegetés a természettörvények és az események, valamint a szimmetria- vagy invarianciaelvek és a természettörvények viszonyáról igen vázlatos. Sok-sok oldalt lehetne írni mindkettőről. Amennyire meg tudom ítélni, az új vonatkozások, melyek ezeken az oldalakon élénk tárulnának, nem rontanak el a két viszony között talált hasonlóságot — azaz: a természettörvények és az események, valamint az invarianciaelvek és a természettörvények viszonyának hasonlóságát. Azok inkább alátámasztanak ezt a hasonlóságot és megerősítik, hogy az invarianciaelvek szerepe: megadni a természettörvények szerkezetét és az összefüggéseket közöttük éppúgy, amint a természettörvények megadják az események sorozatának szerkezetét s az összefüggéseket az események között.

### Geometriai és dinamikai invarianciaelvek

Mi a különbség a régi és jól megalapozott invarianciaelvek, s az új, dinamikai invarianciaelvek között? A geometriai invarianciaelvek — noha a természettörvények számára meghatározott szerkezetet írnak elő — maguknak az eseményeknek segítségével nyernek megfogalmazást. Az idő-eltolásinvariancia megfelelő módon megfogalmazva így hangzik: a korrelációk az események között csak az eseményeket elválasztó időközöktől függenek, de függetlenek az időponttól, melyben az első esemény bekövetkezik. Ha a  $t_1, t_2, t_3$  időpontokban az előbb említett bolygó rendre a  $P_1, P_2, P_3$  pontokban található, úgy ezeket a helyzeteket elfoglalhatná a  $t_1 + t, t_2 + t, t_3 + t$  időpontokban is, ahol  $t$  tetszőleges. Másrésről az új, dinamikai invarianciaelvek a természettörvényekre, vagy pontosabban speciális kölcsönhatástípusokra vonatkoznak, nem korrelációkra az események között. Így ha azt mondjuk, hogy az elektromágneses kölcsönhatás mértékinvariáns, egy speciális természettörvényre utalunk, mely meghatározza a töltések keltette elektromágneses teret, s az elektromágneses tér hatását a töltések mozgására.

Mindebből következik, hogy a dinamikai típusú invarianciák a speciális kölcsönhatástípusok létezésén alapszanak. Mindnyájan olvastunk arról, hogy régen azt



remélték, minden kölcsönhatás lezármaztatható a mechanikai kölcsönhatásokból. Néhányan még emlékszünk rá, hogy ezen évszázad kezdetén az elektromágneses kölcsönhatásokat tekintették minden más kölcsönhatás forrásának. Így szükségessé vált a gravitációs kölcsönhatás kiküszöbölése és sikerült is a gravitációs erőt másképpen, nem mint kölcsönhatást értelmezni. Ezzel szemben jelenleg azt hisszük, hogy négy vagy öt különböző kölcsönhatást ismerünk. Ezek: a gravitációs, az elektromágneses, egy- vagy kétfajta erős (azaz nukleáris) kölcsönhatás, és a bétabomlásért, müonbomlásért és más hasonló jelenségekért felelős gyenge kölcsönhatás. Így tehát feladtuk — legalábbis ideiglenesen — a reményt, hogy minden erőt egyetlen alapvető kölcsönhatásra vezessünk vissza. Ráadásul minden kölcsönhatáshoz tartozik egy-egy dinamikai invarianciacsoport, amilyen pl. az elektromágneses kölcsönhatás mértékcsoportja.

Ez tudásunk jelenlegi foka. Ne feledjük egyébként, hogy a kölcsönhatások problémája jelenleg is rejtély. Utiyama<sup>6</sup> gyümölcsöző gondolatmenetre ösztönzött arról, hogy miképpen találhatjuk ki magát a kölcsönhatást, ha a megfelelő csoportot ismerjük. Azonban nem tudjuk megokolni, miért felel meg kölcsönhatás némely csoportnak, hány ilyen csoport van, s így hányféle kölcsönhatás. A csoportok lényegesen különböznek egymástól és nem tudjuk a különféle kölcsönhatások között fennálló viszonyt felismerni. Hasonlóképpen nem látjuk ezen csoportok kapcsolatát a geometriai szimmetriacsoporttal, mely utóbbi egy jól meghatározott, sok-sok év óta jól ismert csoport.

### Geometriai invarianciaelvek és megmaradási tételek

Minthogy jó *terra cognita*-n tartózkodni amíg csak lehet, tekintsük át először a geometriai invarianciaelveket. A geometriai invarianciacsoportot először *Poincaré* ismerte fel s ezokból *Poincaré*-csoportnak<sup>7</sup> szeretném nevezni. Igazi értelmét és fontosságát csak *Einstein* tárta fel speciális relativitáselméletében. A csoport tartalmazza először az eltolásokat a térben és az időben. Ez azt jelenti, hogy a korrelációk az események között ugyanolyanok mindenütt és minden időben, hogy a természettörvények — a korrelációk kompendiuma — ugyanazok, bármikor s bárhol állapították is meg azokat. Ha ez nem így volna, minden bizonytalanság lehetett volna az emberi elme számára, hogy természettörvényeket fedezzen fel.

Jó itt hangsúlyozni azt a tényt, hogy a szimmetriatörvények az események között fennálló korrelációkra s nem magukra az eseményekre vonatkoznak. Az események természetesen helyről helyre változnak. Ha azonban egy elhajított kő helyzetét megfigyeljük három különböző időpontban, ezen helyzetek között összefüggést találunk, s ez azonos lesz a Föld minden pontján.

A második szimmetria egyáltalán nem olyan nyilvánvaló, mint az első: ez minden térirány egyenértékűségét posztulálja. Ezt az elvet csak akkor lehetett felismerni, amikor megértették: a fel és a le különbségért a Föld vonzásának befolyása felelős. Más szavakkal — ellentétben azzal, amit az imént mondtunk — az események, melyek között a természettörvények korrelációkat állapítanak meg, nem

<sup>6</sup> Utiyama, R., *Phys. Rev.*, **101**, 1597 (1956); lásd még Yang, C. N. és R. L. Mills, *Phys. Rev.*, **96**, 191 (1954).

<sup>7</sup> Poincaré, H., *Compt. Rend.*, **140**, 1504(1905); *Rend. Circ. Mat. Palermo*, **21**, 129 (1906).



az elhajított kő három helyzete, hanem az elhajított kő három helyzete a Földhöz képest.

A legutolsó szimmetria — a természettörvények függetlensége a mozgásállapottól, melyben a jelenséget megfigyeljük, míg ez a mozgás egyenletes — egyáltalán nem nyilvánvaló az elfogulatlan elme számára.<sup>8</sup> Ezen szimmetria egyik következménye, hogy a természettörvények nem a testek sebességét határozzák meg, hanem gyorsulásukat: a sebesség a különböző sebességekkel mozgó koordináta-rendszerekben különböző; a gyorsulás azonos mindaddig, amíg a koordináta-rendszerek mozgása egyenletes. Az egyenletesen mozgó koordináta-rendszerek, valamint az egyenletesen mozgó és nyugvó koordináta-rendszerek egyenértékűségének elvét ennél fogva nem lehetett Newton második törvényének megismerése előtt kimondani; azután maga Newton azonnal felismerte. Az elvet átmenetileg bizonyos elektromágneses jelenségek eredményeképpen kétségbe vonták, de Einstein némileg módosított alakban visszahelyezte jogaiba.

Már említettem, hogy az energia, impulzus és impulzusmomentum megmaradási törvényei közvetlen következményei az imént felsorolt szimmetriáknak. Ez leginkább a kvantummechanikában nyilvánvaló, ahol e törvények közvetlenül következnek az elmélet kinematikájából anélkül, hogy bármiféle dinamikai törvényt — amilyen a Schrödinger-egyenlet — fel kellene használnunk. Ezt nyomban meg fogom mutatni. A helyzet sokkal bonyolultabb a klasszikus elméletben, és a megmaradási tételek legegyszerűbb bizonyítása a klasszikus elméletben arra a megjegyzésre alapozható, hogy a klasszikus elmélet határesetre a kvantumelméletnek. Ennek megfelelően bármely egyenlet, mely érvényes a kvantumelméletben (a  $h$  Planck-állandó tetszőleges értéke mellett), érvényes a  $h=0$  határesetben is. Ezen okfejtés nyomai felfedezhetők azon általános megfontolásokban is, amelyek a megmaradási tételek és a téridő-szimmetriák kapcsolatát mutatják a klasszikus elméletben. A megmaradási tételek levezethetők elemi módszerekkel is, felhasználva a dinamikai egyenletet — azaz Newton második törvényét —, valamint a feltevést, mely szerint az erők csak a részecskék távolságától függő potenciálból származtathatók. Minthogy a potenciál fogalma nem nagyon természetes, ez nem a szokásos eljárás. Mach pl. feltesszi, hogy „az erő, mely tetszőleges részecskére hat, olyan erők összege, amelyek mindegyike más részecskétől származik.”<sup>9</sup> Ilyen feltevés burkoltan Newton harmadik törvényében is bennfoglaltatik, másképpen az ellenhatás (reakcióerő) fogalma értelmetlen volna. Mach ezenkívül felteszi, hogy az erő csak a kölcsönhatásban álló pár helykoordinátáitól függ, sebességeiktől azonban nem. Valamiféle ilyen feltevésre valóban szükség van a klasszikus elméletben.<sup>5</sup> Az imént említett feltevések alapján az impulzus megmaradásának tétele azonnal következik Newton harmadik törvényéből, és megfordítva is, az impulzusmegmaradáshoz szükséges a harmadik törvény. Mindezt már Newton felismerte. Az impulzusmomentum megmaradásának tétele szempontjából, melyet általános alakjában majdnem 60 évvel a Principia után Euler, Bernoulli és d'Arcy fedezett fel,

<sup>8</sup> Így Arisztotelész fizikája posztulálta, hogy a mozgás szükségképpen megköveteli a folytonosan ható okot. Eszerint minden test az abszolút nyugalom állapotába jutna, ha megszüntetnénk az okot, melytől sebességét nyeri. [Vö. pl. A. C. Crombie, *Augustine to Galileo* (London: Falcon Press, 1952), 82. vagy 244. old.] Ez nem lehet igaz egymáshoz képest mozgó koordináta-rendszerekre. Ekkor azok a koordináta-rendszerek, amelyekre ez igaz, kitüntetett mozgásállapotban vannak.

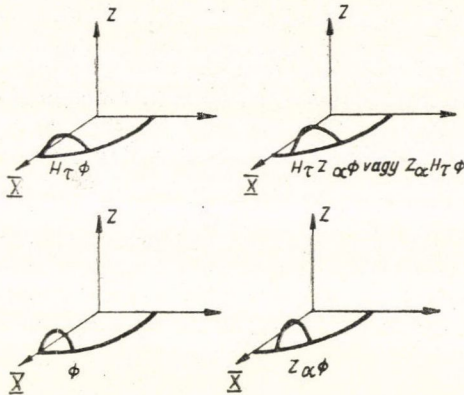
<sup>9</sup> Mach, E., *The Science of Mechanics* (Chicago: Open Court Publ. Co., különféle kiadások), 3. fejezet, 3. szakasz.



a tér izotrópiájának jelentősége nyilvánvaló. Ha valamely részecskepár között ható erő iránya nem egyeznék meg a két részecskét összekötő egyenes irányával, az erő nem volna invariáns az ezen egyenes körül végrehajtott elforgatásokkal szemben. Ennélfogva a tett feltevések mellett csak centrális erők lehetségesek. Minthogy az ilyen erők nyomatóka — ha az erők ellentettben egyenlők — eltűnik, az impulzus-

momentum-törvény következik. Nem következne, ha az erők három vagy több részecske helyzetétől függenének.

A kvantummechanikában — mint már korábban említettem — a megmaradási törvények már az alapvető kinematikai törvényekből következnek. A dolog lényege egyszerűen az, hogy az állapotok a kvantummechanikában egy absztrakt tér vektorai, a fizikai mennyiségek — a helyzetvektor, a sebesség stb. — pedig ezen vektorokra ható operátorok. Ennek alapján pl. a forgásinvarianciából következik, hogy bármely adott  $\varphi$  állapothoz található egy másik  $\varphi_\alpha$  állapot, mely a  $Z$  tengely körül  $\alpha$  szögű elforgatással nyert koordinátarendszerben pontosan olyannak látszik,



1. ábra

szik, mint amilyennek  $\varphi$  az eredeti rendszerben látszott. Az operátort, melyet  $\varphi$ -re alkalmazva  $\varphi_\alpha$  adódik, jelöljük  $Z_\alpha$ -val. Jelöljük továbbá az állapotot, melybe  $\varphi$  a  $\tau$  időköz alatt átmegy,  $H_\tau \varphi$ -vel (a viszonyokat vázlatosan mutatja az 1. ábra). Ekkor a forgásinvariancia folytán  $\varphi_\alpha$  ugyanezen időköz folyamán a  $H_\tau \varphi_\alpha$  állapotba megy át, mely a második koordinátarendszerben pontosan olyannak látszik, mint amilyennek  $H_\tau \varphi$  látszott az elsőben. Eszerint  $H_\tau \varphi_\alpha$  megkapható  $H_\tau \varphi$ -ből, ha erre a  $Z_\alpha$  operátort alkalmazzuk. Innen következik:

$$H_\tau Z_\alpha \varphi = Z_\alpha H_\tau \varphi; \quad (1)$$

minthogy ez bármely  $\varphi$ -re igaz, kapjuk:

$$H_\tau Z_\alpha = Z_\alpha H_\tau. \quad (2)$$

A  $Z_\alpha$  operátor tehát felcserélhető  $H_\tau$ -vel. Ez a feltétele annak, hogy  $Z_\alpha$ -ra megmaradási törvény álljon fenn. A  $Z$  tengelyre vonatkoztatott impulzusmomentum ténylegesen  $(1/\alpha) (Z_\alpha - 1)$  határértéke infinitezimális  $\alpha$ -ra ( $\alpha \rightarrow 0$ ). A többi megmaradási tétel ugyanígy vezethető le. A dolognak az a lényege, hogy a transzformációs operátorok, vagy legalábbis az infinitezimálisak közülük, kettős szerepet játszanak, s azok maguk a megmaradó mennyiségek.

Ezzel befejezzük a geometriai invarianciaelvek tárgyalását. Az olvasó észre fogja venni, hogy a tükrözéseket — melyek *inter alia* a paritás fogalmához vezetnek el — nem említettem, és nem beszéltem arról a látszólag sokkal általánosabb geometriai invarianciaelvről sem, amely az általános relativitáselmélet alapját képezi. Az előbbieik mellőzésének az az oka, hogy a tükrözésoperátorokkal megfontolásaink végén amúgy is foglalkoznom kell. Annak, hogy nem beszéltem az általános relativitáselmélet általános koordinátatranszformációival szemben mutatott in-



varianciáról, az az oka, hogy úgy vélem: az általános relativitáselmélet alapjául szolgáló invariancia nem geometriai, hanem dinamikai jellegű. Vegyük ezért szemügyre a dinamikai invarianciaelveket.

### Dinamikai invarianciaelvek

Amikor a dinamikai invarianciaelvekkel foglalkozunk, a terület, melyen tartózkodunk, nagyrészt *terra incognita*. Mindazonáltal, minthogy az ezen elvek továbbfejlesztésére tett kísérletek némelyike szellemes és sikeres, és minthogy jelenleg a dinamikai invarianciaelvek az érdeklődés középpontjában állnak, szeretnék ezekkel kapcsolatban néhány megjegyzést tenni. Kezdjük a legjobban ismert esettel: az elektromágneses kölcsönhatással.

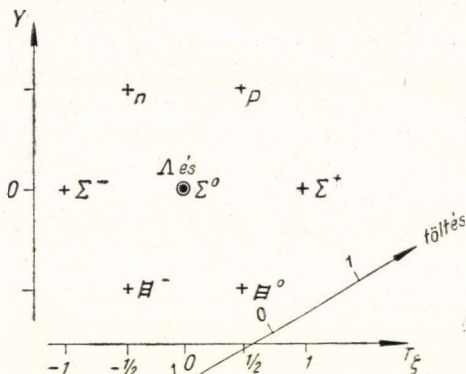
A töltések és az elektromágneses tér kölcsönhatásának leírása céljából először új mennyiségeket vezetünk be az elektromágneses tér leírására, az ún. elektromágneses potenciálokat. Ezekből az elektromágneses térkomponensek könnyen kiszámíthatók, megfordítva azonban ez nem lehetséges. A potenciálokat a tér nem határozza meg egyértelműen; különböző potenciálok, melyek egymástól egy gradiensben különböznek, ugyanazt a teret adják. Ebből következik, hogy a potenciálok nem lehetnek mérhetők; csak olyan mennyiségek lehetnek mérhetők, amelyek invariánsak a potenciálokra önkényesen alkalmazható transzformációkkal szemben. Ez az invariancia nyilvánvalóan mesterkélt; hasonló ahhoz, amelyet úgy kaphatnánk, hogy egyenleteinkbe bevezetjük egy kísértet helykoordinátáit. Az egyenleteknek ekkor invariánsoknak kell lenniök a kísértet koordinátáinak megváltoztatásával szemben. Nem látjuk, ugyan mire jó bevezetni egy kísértet koordinátáit.

Ugyanígy áll a dolog a térerősségek helyett bevezetett potenciálokkal is mindaddig, amíg minden egyebet változatlanul hagyunk. Azt megköveteljük azonban — s ez a döntő lépés —, hogy ha az eredetivel azonos állapotot akarunk másképpen leírni, és a potenciálok valamely sorozatáról áttérünk egy másik, azonos elektromágneses teret adó sorozatra, ezzel össze kell kapcsolnunk az anyagtér egy transzformációját. E két transzformáció kombinációját — egyikük az elektromágneses potenciálokat, másikuk az anyagteret transzformálja — mértéktranszformációnak nevezzük. Minthogy ez a fizikai tényállást változatlanul hagyja, minden egyenletnek invariánsnak kell lennie vele szemben. Ez nem áll pl. a mozgásegyenletekre, azok eredeti (kölcsönhatásmentes) alakjában. A mozgásegyenletek, ha azokat változatlanul hagynánk, azzal a képtelen tulajdonsággal rendelkeznének, hogy két helyzetből, melyek valamely kezdeti időpontban teljesen egyenértékűek, az idő folyamán két megkülönböztethető fizikai szituáció állna elő. A mozgásegyenleteket ennél fogva módosítanunk kell, s ez a legkönnyebben egy matematikai fogás segítségével: a Lagrange-függvény módosítása útján vihető keresztül. A legegyszerűbb módosítás, mely helyreállítja az invarianciát, az elektrodinamika egyenleteire vezet, amelyek összhangban vannak a tapasztalattal.

Mindenek előtt meg szeretném jegyezni — anélkül, hogy kitérnék a részletekre —, hogy hasonló eljárás alkalmazható a gravitációs kölcsönhatás esetére is. Erre a lehetőségre már *Utiyama* rámutatott<sup>6</sup> A szükségtelen komplikáció, melyet ebben az esetben be kell vezetnünk, a potenciálok helyett az általánosított koordináták. Az egyenleteknek invariánsoknak kell lenniök az általános relativitás-



elmélet koordinátatranszformációival szemben. Ez még nem változtatná meg az elmélet tartalmát, csupán hajlékonyabb nyelvezet bevezetését jelentené, melynek segítségével ugyanazon fizikai tényállás több egyenértékű leírása lenne megadható. De ezután posztuláljuk: az anyagtér is transzformálódik a metrikus térrel együtt. Ebből megint az következik, hogy az egyenleteket invarianciájuk biztosítása érdekében módosítanunk kell. A legegyszerűbb módosítás — vagy az egyik a legegyszerűbbek közül — *Einstein* egyenleteire vezet.



2. ábra

Az általános relativitáselmélet invarianciájának az előzőekben megadott értelmezése azt nem geometriai invarianciának tekinti. Arra, hogy az általános relativitáselmélet invarianciája nem geometriai invariancia, már *Fock* orosz fizikus rámutatott.<sup>10</sup> A viszonyokat kissé leegyszerűsítve mondhatjuk: a geometriai invarianciák azt posztulálják, hogy két fizikailag különböző szituáció — amilyeneket pl. az 1. ábra mutat — az idő folyamán olyan szituációkba fejlődjön, amelyek ugyanolyan módon különbözzenek egymástól, mint a kezdhelyzetek. Itt nem ezzel az esettel állunk szemben: csupán azt posztuláljuk, hogy ugyanazon szituáció két különböző leírása az idő folyamán két olyan leírásba fejlődjék, amelyek ugyancsak azonos fizikai szituációt írnak le. A hasonlóság az elektromágneses potenciálok esetével nyilvánvaló.

Sajnos a többi kölcsönhatás esetében más a helyzet. Az erős kölcsönhatások közül a gyengébbikről igen keveset tudunk. Az erős, valamint a gyenge kölcsönhatás csoportja mindenek előtt sokkal kisebb, mint a mértékcsoport vagy az általános koordinátatranszformációk csoportja.<sup>11</sup> A mértékcsoport vagy az általános transzformációcsoport végtelen sok generátora helyett ezeknek véges számú — nyolc — generátoruk van. Mindamellett ezek elégségesek ahhoz, hogy nagymértékben meghatározzák a kölcsönhatás alakját, lehetővé teszik továbbá néhány, a spektroszkópia szabályaihoz hasonló tétel levezetését, melyek közelítő összefüggéseket adnak meg reakciósebességek, valamint energiák — azaz tömegek — között. A 2. ábra nehéz tömegek alkotta oktaplettet mutat, melynek tagjait egymással a kölcsönhatás szimmetriacsoportjának legegyszerűbb olyan nemtriviális ábrázolása kapcsolja össze, amely ekvivalens a komplex-konjugáltjával.

További különbség egyrészt az elektromagnetizmus és a gravitáció invarianciacsoportjai, s másrésztől legalábbis az erős kölcsönhatás invarianciacsoportja között, hogy az előbbieket operációi érvényes szimmetriaoperációk maradnak még akkor is, ha tekintetbe vesszük a többi fajta kölcsönhatás létét. Másrészt, az erős

<sup>10</sup> Fock, V., *The Theory of Space, Time and Gravitation* (New York: Pergamon Press, 1959).

<sup>11</sup> Az erős kölcsönhatásokat illetően vö. Ne'eman, Y., *Nucl. Phys.*, **26**, 222 (1961), és Gell-Mann, M., *Phys. Rev.* **125**, 1067 (1962). A gyenge kölcsönhatásokra vonatkozóan: Feynman, R. P. és M. Gell-Mann, *Phys. Rev.*, **109**, 193 (1958), és Sudershan, E. C. G. és R. E. Marshak, *Phys. Rev.*, **109**, 1960 (1958); továbbá: Sakurai, J. J., *Nuovo Cimento*, **7**, 649 (1958) és Gerstein, G. S. és Ja. B. Zeldovics, *ЖЭТФ* **29**, 698 (1955).



kölcsönhatás szimmetriáját a többi kölcsönhatás „megsérti”, azaz az erős kölcsönhatás csoportjának operációi csak akkor érvényes szimmetriaoperációk, ha a többi fajta kölcsönhatás figyelmen kívül hagyható. A szimmetriacsoport minden esetben segít meghatározni a kölcsönhatás operátorát. Míg azonban az elektromágneses és gravitációs kölcsönhatások csoportjával szemben invariáns minden kölcsönhatás, az erős kölcsönhatás csoportjával szemben csak maga az erős kölcsönhatás invariáns.

Mint már láttuk, a geometriai szimmetriacsoportok operációi megmaradási tételeket vonnak maguk után. Felmerül a kérdés, hogy ugyanez igaz-e a dinamikai szimmetriacsoportok operációira is. Ismét úgy látszik, hogy különbségek vannak a különböző dinamikai invarianciacsoportok között. Általánosan vallott nézet, hogy az elektromos töltés megmaradásának törvénye a mértékinvariancia — azaz: az elektromágneses kölcsönhatás csoportja — következményének tekinthető. Másrészről azonban csak feltevésekbe bocsátkozhatunk azon megmaradási tételeket illetően, amelyeket az általános relativitás dinamikai csoportjával lehetne kapcsolatba hozni. Ami a barion- és leptonmegmaradás törvényeit illeti, itt ismét ésszerű feltenni, hogy azok az erős és a gyenge kölcsönhatás csoportjai segítségével levezethetők.<sup>12</sup> Ha ez igaz, ez azt jelentené, hogy az ezen kölcsönhatásokhoz tartozó csoportokat valójában még nem ismerték fel. Ezen utóbbi kijelentés alátámasztására két érv hozható elő. Először is a szóbanforgó megmaradási törvényeket<sup>13</sup> mindeddig nem sikerült levezetni ezen kölcsönhatások szimmetriatulajdonságaiból, és nem valószínű, hogy azokat le lehessen vezetni belőlük.<sup>14</sup> Másodszor a kérdéses szimmetriatulajdonságok nem szigorúak, hanem más kölcsönhatások megsértik azokat. Nem világos, miképpen következhetnének szigorú megmaradási törvények közelítő szimmetriákból; már pedig minden jel arra mutat, hogy a barion- és a leptonmegmaradás törvénye szigorú.<sup>15</sup> Ez ismét emlékeztet bennünket arra, hogy elgondolásaink a dinamikai invarianciaelvekről korántsem oly szilárdan megalapozottak, mint a geometriai invarianciaelvekről vallott felfogásunk.

Szeretnék végül néhány megjegyzést tenni egy olyan elvre vonatkozóan, amelyet habozás nélkül nevezek szimmetriaelvnek és amely átmenetet képez a geometriai és a dinamikai elvek között. Ez az elv a keresztezési összefüggésekben nyer kifejezést.<sup>15</sup> Vegyük szemügyre valamely

$$A + B + \dots \rightarrow X + Y + \dots \quad (3)$$

<sup>12</sup> A barionmegmaradás törvénye és az erős kölcsönhatás esetére ezt a gondolatot a szerző vetette fel, *Proc. Am. Phil. Soc.*, **93**, 521 (1949) és *Proc. Nat. Acad. Sci.* **38**, 449 (1952). A barionmegmaradás törvényét először E. C. G. Stueckelberg posztulálta, *Helv. Phys. Acta*, **11**, 299 (1938).

<sup>13</sup> Ezen és más megmaradási tételek kísérleti igazolását illetően lásd Feinberg G. és M. Goldhaber, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **45**, 1301 (1959). A leptonmegmaradás törvényét Marx Gy. javasolta, *Acta Phys. Hung.*, **3**, 55 (1953); továbbá Zeldovics Ja. B., *ДАН СССР*, **91**, 1317 (1953) és Konopinski, L. J. és H. M. Mahmoud, *Phys. Rev.* **92**, 1045 (1953). Határozott kifejezést, úgy látszik, T. D. Lee és C. N. Yang dolgozatában nyert, *Phys. Rev.*, **105**, 1671 (1957). Lásd még Fermi észrevételét, melyet C. N. Yang és J. Tiomno említ, *Phys. Rev.* **79**, 497 (1950).

<sup>14</sup> Ami a barionmegmaradást és az erős kölcsönhatást illeti, erre J. J. Sakurai mutatott rá igen érdekes cikkében, *Ann. Phys.* **11**, 1 (1960). A leptonokkal kapcsolatban lásd Marx Gy., *Z. Naturforsch.*, **9a**, 1051 (1954).

<sup>15</sup> Goldberger, M. L., *Phys. Rev.*, **99**, 979 (1955); Gell-Mann, M. és M. L. Goldberger, *Phys. Rev.*, **96**, 1433 (1954). Lásd Watson, K. M., *Collision Theory* (New York: John Wiley and Sons, 1964). 10. fejezet.



ütközés valószínűségi amplitúdóját. Ez függvénye lesz azon invariánsoknak, amelyek a beeső és a kibocsátott részecskék impulzus-négyesvektoraiból képezhetők. Az „időtükörözés-invarianciá”-ból — azon tükrözési elvek egyikéből, amelyeket nem tárgyaltam — következik, hogy (3) amplitúdója igen egyszerű módon meghatározható az

$$X + Y + \dots \rightarrow A + B + \dots \quad (4)$$

inverz reakció amplitúdóját is. Ha minden sebességet ellentettre változtatunk, továbbá felcseréljük a múltat és a jövőt (ami az időtükrözés definíciója), úgy a (4) reakció (3)-ba megy át; így a két folyamat amplitúdója lényegében megegyezik. Hasonlóképpen ha  $A$  antirészecskéjét  $\bar{A}$ -sal,  $B$ -ét  $\bar{B}$ -sal jelöljük st., és szemügyre vesszük az

$$\bar{A} + \bar{B} + \dots \rightarrow \bar{X} + \bar{Y} + \dots \quad (5)$$

reakciót, ennek amplitúdóját közvetlenül megadja (3) amplitúdója, minthogy — Lee és Yang értelmezése szerint — az (5) reakció (3)-ból tértükörözéssel nyerhető. Az

$$\bar{X} + \bar{Y} + \dots \rightarrow \bar{A} + \bar{B} + \dots \quad (6)$$

reakció amplitúdói hasonlóképpen nyerhetők. A (3), (4), (5) és (6) reakciók amplitúdói között fennálló összefüggések geometriai invarianciaelvek következményei.

De tovább is mehetünk. A keresztezési összefüggések megmondják, hogyan kell kiszámítani pl.

$$\bar{X} + B + \dots \rightarrow \bar{A} + Y + \dots \quad (7)$$

amplitúdóját (3) amplitúdóinak rendszeréből. Kétségtelen, hogy ez a számítás vagy eredménye nem mondható egyszerűnek. A (3) reakció amplitúdóját mint a (3)-ban résztvevő részecskék impulzusaiból képezett invariánsok analitikus függvényeit kell vizsgálnunk, s ezt az analitikus függvényt ki kell terjesztenünk a változók olyan értékeire, amelyeknek a (3) reakcióban nincs fizikai jelentésük, de amelyek megadják (7) amplitúdóját. Nyilvánvaló, hogy több más reakcióamplitúdó van, mely hasonló módon megkapható; ezek mind (3) — vagy valamelyik másik reakció — amplitúdójának analitikus folytatása útján nyerhetők. Így  $A$  és  $X$  felcserélése helyett, mely (7)-re vezet, felcserélhettük volna  $A$ -t és  $Y$ -t st.

A keresztezési összefüggések rendelkeznek a geometriai invarianciaelvek két tulajdonságával: nem csak a kölcsönhatástípusok egyikére vonatkoznak, és — így véljük legtöbbször — érvényességüknek nincs határa. Másrésztől, noha megfogalmazhatók az események segítségével, megfogalmazásuk előfeltétele bizonyos természettörvények — valamelyik említett reakció amplitúdójára vonatkozó matematikai, pontosabban analitikus kifejezés — megállapítása. Talán remélhetjük, hogy a keresztezési összefüggések segítenek majd kapcsolatot létesíteni a geometriai és dinamikai invarianciaelvek között, melyek között jelenleg nem látható kapcsolat.

*Fordította: Györgyi Géza*

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Dáoloki János

A kézirat beérkezett: 1965. II. 8. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 7,7 (A5) iv, 45 ábra

Szegedi Nyomda Vállalat 65-5656



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:

43-790 057-181) útján eszközölhetők.

**Ára: 10,— Ft.**

**Előfizetés kötetenként: 42,— Ft**

INDEX: 26.591
---------------

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Lendvay Ödön: A kristálynövesztés diffúziós módszeréről .....</i>	231
<i>Berényi Dénes: Dinamikus magstruktúra effektusok belső konverziónál .....</i>	251
<i>Deme Sándor és Csákány Antal: Félvezető magsugárzás detektorok és spektrométerek. I. ....</i>	273
<i>Wigner Jenő: Szimmetria és a megmaradási tételek .....</i>	309



307.226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XIII. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1965

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL : BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok közlésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt megjelent munkájáért 100 különlenyomat illet meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adnak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# RUGALMAS NEUTRON-SZÓRÓDÁS A $C^{12}$ ATOMMAGON\*

LOVAS ISTVÁN

Elméleti Fizikai Intézet, Koppenhága  
Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## Bevezetés

Az atommagokon történő nukleon szórás problémáját általában két ellentétes végletet képviselő álláspont valamelyikéről szokás megközelíteni.

Az egyik végletet optikai, vagy más néven „egy kvázirészecskés” modellnek nevezhetjük. Ezen modell alapfeltevései közé tartozik, hogy a bombázó nukleon és a target mag között csak mérsékelt erő a kölcsönhatás, a beeső nukleon nagy mértékben megőrzi individualitását, úgy hogy a kölcsönhatás egy átlag potenciállal leírható. A beeső nukleon és a target mag nukleonjai közötti individuális kölcsönhatástól eltekintünk és azt a lehetőséget, hogy a bombázó nukleon ezen figyelmen kívül hagyott egyedi ütközések következtében eltűnhet a bemenő csatornából, egy megfelelően választott imaginárius potenciállal vesszük figyelembe. Ez a modell, minthogy a target magnak csak az átlagos, durva tulajdonságait veszi számításba, természetesen képtelen a szórási hatáskeresztmetszet finom sajátosságairól számot adni, az óriás rezonanciákat mutató durva szerkezetét azonban elég jól visszautkrözi.

A másik végletet „sok kvázirészecskés” modellnek nevezhetjük. Ez a modell *Niels Bohrn*nak a compound-magra vonatkozó elgondolását alapul véve feltételezi, hogy a beeső nukleon és a target mag között fellépő erős kölcsönhatás következtében a bombázó nukleon nagy valószínűséggel elveszti individualitását, a target mag nukleonjaival való sorozatos ütközések folytán energiája lecsökken és eközben a rendszer sok gerjesztett részecskét, vagy helyesebben sok kvázirészecskét tartalmazó állapotba kerül. Bizonyos gerjesztési energia értékeknél hosszú élettartamú kvázistacionárius állapotok alakulnak ki, amelyek növekvő energiával egyre sűrűbben jelentkeznek. Ez a modell elvben számot tud adni a szórási hatáskeresztmetszetben megfigyelhető, alacsony energián jól szeparált, éles, növekvő energiával egymást egyre jobban átfedő rezonanciákról.

Az egy kvázirészecskés modell kvantitatív megfogalmazása teljesen egyszerű és semmilyen gyakorlati nehézségbe nem ütközik. Ezzel szemben a sok kvázirészecskés modellnek a részletes kvantitatív elemzését rendkívülien megnehezíti a compound állapotok nagyfokú bonyolultsága.

Éppen ezért az utóbbi időben a figyelem egyre jobban a „néhány kvázirészecskés” modellre terelődött. *Feshbach*nak és munkatársainak számos magfizikai jelenséget sikerült jobban megérteni a három kvázirészecskés modell alapján. Ez a modell stratégiai fontosságot tulajdonít az első individuális nukleon-nukleon ütközés következtében kialakuló három kvázirészecskés állapotnak, amely a target mag állapotához viszonyítva egy nukleon lyukat és két fölös nukleont tartalmaz. A há-

\* Érkezett 1964. november 3.

rom kvázirészecskés állapotok figyelembe vételével meg lehet magyarázni a különböző folyamatok hatáskeresztmetszetében újabban megfigyelt „fél-finom” szerkezetet. Ez a fél-finom struktúra olyan rezonancia szerű ingadozásokban jelentkezik, amelyeknek a szélessége kisebb mint az egy-részecske rezonanciáké, de ugyanakkor az éles compound rezonanciáknál lényegesen nagyobb, hozzávetőlegesen 100 KeV nagyságrendű, közepes és nehéz magok esetén. A megfigyelt ingadozási maximumok átlagos távolsága 300 KeV nagyságrendben mozog. Ugyancsak eredményesen alkalmazható ez a modell a neutron „erőfüggvényben” észlelhető fluktuációk magyarázatára. Újabban *Lemmer* és *Shakin* a  $N^{15}$  magon történő neutron szórást tanulmányozták a három kvázirészecskés modell alapján és eredményeikből az a következtetés olvasható ki, hogy könnyű magok esetén, ahol a compound állapotok elég nagy amplitúddal tartalmazzák a háromkvázirészecskés állapotot, legalább is alacsony gerjesztéseknél, a modell elég jó közelítést ad a hatáskeresztmetszet részletes szerkezetének elemzéséhez.

Ebben a dolgozatban a három kvázirészecskés modellt alkalmazzuk a  $C^{12}$  magon történő rugalmas neutron szórás hatáskeresztmetszetének vizsgálatára.

Minthogy a részletes elemzés során a Feshbach-féle magreakció elméletet tekintettük kiindulási alapnak, azért célszerűnek látszik először röviden összefoglalni ezen elmélet legfontosabb elemeit.

### A szórási amplitúdó

A szórásprobléma tárgyalásánál az  $(A+1)$  nukleonból álló rendszer

$$H\Psi = E\Psi$$

Schrödinger-egyenletének megoldását célirányos az  $A$  nukleonból álló rendszer lehetséges  $\varphi_i(x_1 \dots x_A)$  állapotai szerint kifejezni

$$\Psi = \mathcal{A} \left[ \sum_i u_i(x_0) \varphi_i(x_1 \dots x_A) \right]$$

ahol  $\mathcal{A}$  az antiszimmetrizálás operátora. Az energiaskálát úgy választjuk meg, hogy a target mag  $\varphi_0(x_1, \dots, x_A)$  alapállapotához zérus energia érték tartozzék:  $\varepsilon_0 = 0$ . A rendszer teljes  $E$  energiája tehát a bombázó nukleon kinetikus energiájával egyezik meg. Ha  $E$  kisebb mint a target mag első gerjesztett állapotának energiája  $E < \varepsilon_1$ , akkor csak rugalmas szórás fordulhat elő. Ebben az esetben  $u_0(x_0)$  asszimptotikusan egy beeső síkhullámot és kifutó gömbhullámokat tartalmaz és valamennyi  $u_i(x_0)$  ( $i \neq 0$ ) függvény a végtelenben exponenciálisan lecseng.

Olyan  $E$  energia értéknél, amelyeknél már rugalmatlan folyamatok is előfordulhatnak ( $E > \varepsilon_1$ ) az  $u_i(x_0)$  ( $i \neq 0$ ) függvények közül bizonyosak asszimptotikusan kifutó gömbhullámként viselkednek. Rugalmas szórás esetén valamennyi mérhető mennyiségre vonatkozó információt az  $u_0(x_0)$  függvény magába foglalja. Éppen ezért célszerű a rendszer hullámfüggvényét felbontani két egymásra ortogonális komponensre, amelyek közül az egyik csupán a rugalmas szórásnak megfelelő  $u_0(x_0)$  és a target alapállapotának megfelelő  $\varphi_0(x_1, \dots, x_A)$  függvényt tartalmazza:

$$\Psi = \mathcal{A} [u_0(x_0) \varphi_0(x_1 \dots x_A)] + \mathcal{A} \left[ \sum_{i \neq 0} u_i(x_0) \varphi_i(x_1 \dots x_A) \right]$$



Feshbach nyomán bevezetjük a  $P$  és  $Q$  projekciós operátorokat, amelyek ezt a felbontást megvalósítják:

$$P\Psi = \mathcal{A}[u_0(x_0)\varphi_0(x_1 \dots x_A)]$$

$$Q\Psi = \mathcal{A}\left[\sum_{i \neq 0} u_i(x_0)\varphi_i(x_1 \dots x_A)\right]$$

A hullámfüggvény két komponensének meghatározására egy csatolt egyenletrendszer kapunk:

$$[E - PHP]P\Psi = [PHQ]Q\Psi$$

$$[E - QHQ]Q\Psi = [QHP]P\Psi$$

A teljes hullámfüggvénynek a bennünket érdeklő  $P\Psi$  komponensére, illetve  $Q\Psi$ -re a fenti egyenletrendszer alapján az

$$[E - PHP]P\Psi = \left[PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP\right]P\Psi$$

$$[E - QHQ]Q\Psi = \left[QHP \frac{1}{E - PHP + i\varepsilon} PHQ\right]Q\Psi + [QHP]\chi^{(+)}$$

egyenleteket nyerjük, ahol  $\chi^{(+)}$  megoldása az

$$[E - PHP]\chi^{(+)} = 0$$

homogén egyenletnek  $\chi^{(+)}$  asszimptotikusan alapállapotban levő targetmagot, beeső síkhullámot és kifutó gömbhullámokat ír le, másszóval ugyanazon határfeltételeknek tesz eleget mint  $P\Psi$ . A  $P\Psi$ -re vonatkozó egyenletet a határfeltételeket is magába foglaló Schwinger—Lippmann-típusú integrálegyenletté alakíthatjuk:

$$P\Psi^{(+)} = \chi^{(+)} + \frac{1}{E - PHP + i\varepsilon} \left[PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP\right]P\Psi^{(+)}$$

Ebből az egyenletből kiindulva a rugalmas szórás  $T$  mátrixára a szokásos eljárással a következő kifejezést kapjuk:

$$T_{fi} = \langle \eta_f | PHP - H_0 | \chi_i^{(+)} \rangle + \\ + \left\langle \chi_f^{(-)} \left| PHQ \frac{1}{E - QHQ - QHP \frac{1}{E - PHP + i\varepsilon} PHQ} QHP \right| \chi_i^{(+)} \right\rangle$$

Az  $i$  és  $f$  indexek a kezdeti és végállapotot kimerítően jellemző kvantumszámok jelölésére szolgálnak.

$H_0$  a target magból és a bombázó nukleonból álló kölcsönhatásmentes rendszer Hamilton operátora,  $\eta_f$  pedig  $H_0$  sajátfüggvényét jelöli.  $\langle \eta_f | PHP - H_0 | \chi_i^{(+)} \rangle$  a szórási mátrix elemnek azt a járulékát szolgáltatja, amely a  $PHP$  Hamilton-operátorban szereplő kölcsönhatási tagtól származik és a potenciálszórást írja le.

Az elméletnek ezen formális és elnagyolt kifejtésében sem mélyebb fizikai értelmezést, sem szemléletes képet nem fűztünk az előforduló mennyiségekhez; ezt a mulasztást azután pótoljuk, miután konkrét közelítéseket vezettünk be.

Ha ezen eljárást konkrét esetre akarjuk alkalmazni, azaz ha a  $T$  mátrix elemeket és ezek segítségével a szórási hatáskeresztmetszetet ténylegesen ki akarjuk számítani, akkor általában egyszerűsítő feltevésekre és közelítésekre kényszerülünk. Az áttekinthetőség kedvéért a továbbiakban módszeresen felsoroljuk először az általános érvényű egyszerűsítő feltevéseket majd azután a  $C^{12}$  magon történő neutron-szórás hatáskeresztmetszetének kiszámításánál alkalmazott speciális közelítéseket.

### III. Általános feltevések

Először is definiálnunk kellene a  $H$  Hamilton operátort, de ennél célszerűbb ha közvetlenül az általános elméletben előforduló  $PHP$ ,  $QHQ$ ,  $PHQ$  illetve  $QHP$  operátorokra vezetünk be olyan ésszerű feltevéseket, amelyek a valóságos helyzetnek még tartalmazzák a leglényegesebb vonásait, de elég egyszerűek ahhoz, hogy a szokásos matematikai eszközökkel még kezelhetőek legyenek.

I. A  $P$  operátor definíciójánál fogva a  $PHP$  Hamilton-operátornak csak olyan sajátfüggvényei lehetnek, amelyek asszimptotikusan beeső síkhullámot, kifutó gömbhullámokat és alapállapotban levő target magot írnak le. Éppen ezért indokolt  $PHP$ -t az optikai modell Hamilton-operátorával helyettesíteni. Minthogy kizárólag a rugalmas szórás iránt érdeklődünk, azaz az  $E$  energiával a rugalmatlan küszöb alatt maradunk, a radiációs befogástól pedig nyugodtan eltekinthetünk, azért az optikai potenciál nem tartalmaz imaginárius részt:

$$I. \quad PHP \Rightarrow H_0 + V_c f(r) + V_{s0} \left( \frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{df}{dr} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma})$$

Az  $f(r)$  alakfaktort a Saxon—Wood-féle kifejezéssel azonosítjuk:

$$f(r) = \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad a = 0,65 \cdot 10^{-13} \text{ cm}; \quad R = 1,25 A^{1/3} \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

A centrális és a spin pálya kölcsönhatás erősségére jellemző  $V_c$  és  $V_{s0}$  paraméterek meghatározásáról a későbbiek során lesz szó.

II. A  $Q$  operátor definíciójánál fogva a  $QHQ$  operátor két lényeges tulajdonság tekintetében különbözik az eredeti  $H$  Hamilton-operátortól:

1. Míg  $H$ -nak a spektruma pozitív  $E$  energia sajátértékek esetén mindvégig folytonos, addig  $QHQ$ -nak a spektruma az első rugalmatlan küszöb ( $E < \varepsilon_1$ ) diszkrét és csak a küszöb felett válik folytonossá.

2. Míg  $H$  állapottere tartalmazza az  $(A+1)$  nukleonból álló rendszer összes lehetséges állapotát, addig  $QHQ$  állapotteréből ki vannak rekesztve a rugalmas csatornának megfelelő állapotok.

Minthogy bennünket a továbbiakban csak a rugalmas szórás esete érdekel, amikor is  $QHQ$  spektruma diszkrét, azért kézenfekvő  $QHQ$ -t az  $(A+1)$  nukleonból álló rendszer „héjmodell” Hamilton-operátorával helyettesíteni.

$$II. \quad QHQ \Rightarrow H^{HM} = \sum_{i=0}^A (T_i + V(x_i)) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^A V(x_i x_k)$$



ahol  $V(x_i)$  egy megfelelően választott spin-pálya kölcsönhatást is tartalmazó egy-részecske potenciál,  $V(x_i x_k)$  pedig a „maradék kölcsönhatást” megszemélyesítő két-részecske operátor. A  $QHQ$  operátornak ez a közelítése önmagában még nem elegendő, kifejezésre kell juttatnunk a 2. pont alatt említett tulajdonságot is. Ezt elvben a konvencionális héjmodell keretei között a következőképpen valósíthatjuk meg.

Megfelelően választott  $\Phi_\beta(x_1, \dots, x_A)$  ortogonális bázisrendszerben képezzük a target mag Hamilton-operátorának mátrixát, majd azt diagonalizálva meghatározzuk az alapállapothoz tartozó sajátfüggvényt:

$$\Psi_0(x_1 \dots x_A) = \sum_{\beta} C_{\beta}^0 \Phi_{\beta}(x_1 \dots x_A)$$

Ezután a  $\Phi_{\beta}(x_1, \dots, x_A)$  bázisrendszer elemeiből és megfelelő  $\varphi_{\gamma}(x_0)$  egy-részecske függvényekből vektor csatolással és antiszimmetrizálással képezzük az  $A+1$  nukleon koordinátától függő, teljesen antiszimmetrikus

$$\Phi_{\alpha}^{(\beta\gamma)}(x_0 x_1 \dots x_A) = A[\Phi_{\beta}(x_1 \dots x_A) \varphi_{\gamma}(x_0)]^{\alpha}$$

bázisrendszert. Ha az  $A+1$  tömegszámú magra vonatkozó héjmodell számítást akarnánk elvégezni, akkor a Hamilton-operátor mátrixát ezen bázisrendszerben diagonalizálnánk. Jelen esetben azonban, minthogy a  $QHQ$  operátort kívánjuk diagonalizálni, azért ezt a bázisrendszert meg kell csonkítanunk, oly módon, hogy a target mag alapállapotát tartalmazó lineár kombinációkat

$$\sum_{\beta} C_{\beta}^0 \Phi_{\alpha}^{(\beta,\gamma)}(x_0 x_1 \dots x_A) = A[\Psi_0(x_1 \dots x_A) \varphi_{\gamma}(x_0)]^{\alpha}$$

elhagyjuk, és a megmaradt lineárisan független elemekből, az elhagyott altérre ortogonális bázisrendszert szerkesztünk. Ezzel az eljárással biztosítani lehet a 2. pontban említett követelmény teljesülését. A továbbiakban feltételezzük tehát, hogy a Hilbert-tér  $Q\Psi$  alterét a fentiekben vázolt eljárással megszerkesztett bázisrendszer feszíti ki. Célszerű ezen bázisfüggvényeknek mindjárt azokat a  $\Phi_n$  lineár-kombinációt bevezetni, amelyek a  $QHQ$  operátor sajátfüggvényei:

$$(E_n - QHQ) \Phi_n = 0$$

Megjegyezzük, hogy valójában a  $Q\Psi$  alteret teljesen csak a  $QHQ$  operátornak diszkrét és folytonos sajátértékeihez tartozó sajátfüggvények együttesen feszítik ki. Ha azonban a rendszer teljes energiája a rugalmatlan küszöb alatt marad ( $E < \epsilon_1$ ) akkor elegendő csupán a diszkrét  $\Phi_n$  sajátfüggvényeket megtartani.

III. A  $P$  és  $Q$  operátorok definíciójából következik, hogy a  $PHQ$  és  $QHP$  operátorok kapcsolatot létesítenek a Hilbert-tér  $P\Psi$  és  $Q\Psi$  ortogonális alterei között, azaz egyedül ezeknek az operátoroknak különböznek zérustól a  $P\Psi$ , illetve  $Q\Psi$  elemeivel képezett mátrixelemei. Teljesen természetes feltételezni, hogy a maradék kölcsönhatás az, amely képes előidézni az átmenetet a  $P\Psi$  és  $Q\Psi$  állapotai között. Ezért a  $PHQ$  és  $QHP$  operátorokat a maradékkölcsönhatás operátorával azonosítjuk:

$$\text{III. } PHQ, QHP \Rightarrow V_R = \sum_{k=1}^A V(x_0, x_k)$$



Az alapállapotban levő target magból és ennek potenciálterében mozgó nukleonból álló rendszert, amelyet a  $\chi_{CE}^{(+)}$  függvény ír le, nevezzük röviden „egy kvázirészecskés” rendszernek. Minthogy a maradékkölcsönhatás operátora két-nukleon kölcsönhatások összegeként áll elő, avagy a másodkvantált formalizmus nyelvét használva, csupán két részecske keltő és két részecske eltüntető operátort tartalmaz, azért az egy kvázirészecskés állapotot csak legfeljebb három kvázirészecskés állapottal kapcsolhatja össze. Szemléletesen ez annak felel meg, hogy a bombázó részecske ütközik a target mag valamely nukleonjával, ez a nukleon egy be nem töltött magasabb energiájú állapotba gerjesztődik, miközben a target magban egy lyuk marad vissza, a bombázó nukleon pedig, amely pozitív energiával rendelkezett, az ütközés során elszorított energiavesztésének megfelelően egy be nem töltött kötött állapotba kerül. Ezt a target mag alapállapotához viszonyítva egy lyukat és két fölös részecskét tartalmazó rendszert nevezzük röviden három kvázirészecskés rendszernek. További ütközések következtében egyre több kvázirészecskét (5, 7, 9, ...) tartalmazó állapotok jöhetnek létre. A tényleges compound állapot ilyen különböző számú kvázirészecskét tartalmazó állapotok bonyolult szuperpozíciójaként áll elő. Az első ütközés során kialakuló három kvázirészecskés állapot igen fontos stratégiai szerepet játszik az egész folyamatban, mert ennek kialakulása után jöhetnek csak létre, további ütközések révén a bonyolultabb, több kvázirészecskét tartalmazó állapotok. Ezért szokás ezt az állapotot külön névvel „hídő” vagy „doorway” állapotnak nevezni. A hídő állapot a kétrészecske kölcsönhatások eredményeként nemcsak bonyolultabb állapotoknak adhatja át a helyét, de vissza is bomolhat a rugalmas csatornának megfelelő egy kvázirészecskés állapotba. Ha a rendszer teljes energiája kicsi és a rendszer szabadsági fokainak száma alacsony, akkor ez az elbomlás sokkal valószínűbb lehet, mint a sok kvázirészecskés állapotok kialakulása. Másszóval a tényleges compound állapot döntő súllyal tartalmaz három kvázirészecskés állapotot.

A továbbiakban a rugalmas szórás  $T$  matrixelemének szerkezetét fogjuk részletesebben elemezni a tett feltevések és a bevezetett közelítések birtokában.

A  $T$  matrixelem első tagja az energiának lassan változó függvénye, amely a potenciálszórásról azaz a hatáskeresztmetszetben jelentkező, széles egy-részecske rezonanciákról ad számot. Olyan energia értékeknél, amelyeknél az egy és a három kvázirészecskés állapot közelítőleg elfajult, a  $T$  matrixelem második tagja hirtelen rezonancia jellegű változást mutat. Ezeknek a rezonanciáknak az átlagos távolsága és szélessége jóval kisebb, mint az egy-részecske rezonanciáké.

Kihasználva azt a feltevést, hogy a  $QHQ$  diszkrét  $\Phi_n$  sajátfüggvényei teljes rendszert alkotnak a  $Q\Psi$  altérben és ugyanígy a  $PHP$   $\chi_{CE}$  sajátfüggvényei a  $P\Psi$  altérben a  $T$  mátrix elemet a következő alakba írhatjuk:

$$T_{fi} = T_{fi}^{(P)} + \sum_{mn} \langle \chi_{fE}^{(-)} | PHQ | \Phi_n \rangle \cdot \left\langle \Phi_n \left| \frac{1}{E - QHQ - QHP \frac{1}{E - PHP + i\epsilon} PHQ} \right| \Phi_m \right\rangle \langle \Phi_m | QHP | \chi_{iE}^{(+)} \rangle$$

Az

$$A^{-1} = \left( E - QHQ - QHP \frac{1}{E - PHP + i\epsilon} PHQ \right)^{-1}$$



inverz operátor matrixa felírható, úgy is mint az eredeti  $A$  operátor matrixának az inverze, éppen ezért foglalkozzunk előbb az  $A$  operátor matrixának tulajdonságaival.

$$A_{rs} = \left\langle \Phi_r \left| E - QHQ - QHP \frac{1}{E - PHP + i\varepsilon} PHQ \right| \Phi_s \right\rangle =$$

$$= (E - E_r) \delta_{rs} - \sum_c \int d\mathcal{E} \langle \Phi_r | QHP | \chi_{c\mathcal{E}} \rangle \frac{1}{E - \mathcal{E} + i\varepsilon} \langle \chi_{c\mathcal{E}} | PHQ | \Phi_s \rangle$$

A  $PHP$  operátornak itt előforduló

$$\sum_c \int d\mathcal{E} \frac{|\chi_{c\mathcal{E}}\rangle \langle \chi_{c\mathcal{E}}|}{E - \mathcal{E} + i\varepsilon}$$

Green-operátora helyett, amint az könnyen belátható, bevezethetjük a megfelelő  $g_{cE}^{(+)}(r_0, r'_0)$  radiális Green-függvényt a következő módon:

$$A_{rs} = (E - E_r) \delta_{rs} - \sum_c \int r_0 r'_0 dr_0 dr'_0$$

$$\langle \Phi_r | QHP | c; r_0 \rangle g_{cE}^{(+)}(r_0 r'_0) \langle c; r'_0 | PHQ | \Phi_s \rangle$$

Ahol a  $\langle \Phi_r | QHP | c; r_0 \rangle$  alakfaktor annyiban különbözik a  $\langle \Phi_r | QHP | \chi_{cE} \rangle$  mátrix-elemtől, hogy nem tartalmazza a szóródást szenvedő nukleon radiális hullámfüggvényét és az  $r_0$  radiális koordinátára nincs kiintegrálva, következésképp  $r_0$ -nak a függvénye. A kifutó hullámoknak megfelelő  $g_{cE}^{(+)}(r_0, r'_0)$  radiális Green-függvény a következő alakban adható meg:

$$g_{cE}^{(+)}(r_0 r'_0) = -\pi [v_{cE}(r_0) w_{cE}(r'_0) \theta(r_0, r'_0) +$$

$$+ v_{cE}(r'_0) w_{cE}(r_0) (1 - \theta(r_0, r'_0)) + i v_{cE}(r_0) v_{cE}(r'_0)]$$

ahol  $v_{cE}$  és  $w_{cE}$  az optikai potenciált tartalmazó egy-részecske Schrödinger-egyenletnek a reguláris és irreguláris megoldása a szokásos asszimptotikával, és normálással:

$$v_{cE}(r_0) \rightarrow \sqrt{\frac{k}{\pi E}} \sin \left( k r_0 - \frac{\pi l}{2} + \delta_c \right) \quad \text{ha } r_0 \rightarrow \infty$$

$$w_{cE}(r_0) \rightarrow \sqrt{\frac{k}{\pi E}} \cos \left( k r_0 - \frac{\pi l}{2} + \delta_c \right) \quad \text{ha } r_0 \rightarrow \infty$$

A  $\theta(r_0, r'_0)$  ugrásfüggvény értéke 1, ha  $r_0 < r'_0$  egyébként zérus. Megjegyzendő, hogy a Green-függvénynek ez az alakja csak akkor helyes, ha vagy eltekintünk a bomló nukleonnak a target magbéli nukleonokkal való azonosságától, azaz az antiszimmetrizálástól, vagy kimutatjuk, amint azt a konkrét esetekben gyakran lehet-

séges, hogy az

$$\int \varphi_0^*(x_1 x_2 \dots x_A) u_0(x_1) \varphi_0(x_0 x_2 \dots x_A) dx_1 \dots dx_A$$

kicserélődési integrál eltűnik [3].

Ezek alapján az  $A$  matrixelem a jól ismert Breit—Wigner nevező alakját ölti fel:

$$A_{rs}(E) = (E - E_r) \delta_{rs} - \Delta_{rs}(E) + \frac{i}{2} \Gamma_{rs}(E)$$

ahol a  $\Delta$  nívóeltolódást és a  $\Gamma$  nívószélességet a

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta_{rs}(E) &= -\pi \sum_c \int dr_0 dr'_0 r_0 r'_0 \langle \Phi_r | QHP | c; r_0 \rangle \cdot \\ &\quad \cdot \{ v_{cE}(r_0) w_{cE}(r'_0) \theta(r_0, r'_0) + v_{cE}(r'_0) w_{cE}(r_0) (1 - \theta(r_0, r'_0)) \} \cdot \\ &\quad \cdot \langle c; r'_0 | PHQ | \Phi_s \rangle \\ \Gamma_{rs}(E) &= 2\pi \sum_c \int dr_0 dr'_0 r_0 r'_0 \langle \Phi_r | QHP | c; r_0 \rangle \cdot \\ &\quad v_{cE}(r_0) v_{cE}(r'_0) \langle c; r_0 | PHQ | \Phi_s \rangle \end{aligned} \right.$$

egyenletek definiálják. Bevezetve az

$$(\Gamma_r^c)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dr_0 r_0 \langle \Phi_r | QHP | c; r_0 \rangle v_{cE}(r_0)$$

jelölést, a  $T$  matrixelem a következő alakba írható:

$$T_{fi} = T_{fi}^{(P)} + \frac{1}{2\pi} \sum_{mn} e^{i\delta_f} (\Gamma_n^f)^{1/2} \left( \frac{1}{E - E_n - \Delta + \frac{i}{2} \Gamma} \right)_{nm} (\Gamma_m^i)^{1/2} e^{i\delta_i}$$

Itt kihasználtuk azt a tényt, hogy a  $\chi_{cE}^{(+)}$  hullámfüggvényben szereplő, „beeső sík-hullám + kifutó hullámok” aszimptotikának eleget tevő  $u_{cE}^{(+)}$  hullámfüggvény a  $v_{cE}$  reguláris megoldás segítségével az  $u_{cE}^{(+)} = e^{i\delta_i} v_{cE}$  alakban fejezhető ki, ahol  $\delta_c$  az optikai potenciál következtében létrejövő fáziseltolódás.

Ha a  $Q\Psi$  és  $P\Psi$  állapotok egymáshoz gyengén csatolódnak, akkor bizonyos esetekben megengedhető az  $A^{-1}$  matrixának az  $(1/A_{rr})\delta_{rs}$  diagonális matrixszal való közelítése és ekkor a Breit—Wigner-féle diszperziós kifejezést nyerjük. Általában azonban a csatolódás erős és ekkor a  $\Phi_r$  állapotok a  $P\Psi$  állapotok közvetítésével egymáshoz is erősen csatolódnak és ekkor már az  $A^{-1}$  nem-diagonális elemeit nem lehet elhanyagolni.



Végül a rugalmas nukleon szórás hatáskeresztmetszetét a  $T$  matrixelemek birtokában egyszerűen kifejezhetjük:

$$\sigma(E) = \frac{4\pi^3}{k^2} \sum_J \frac{(2J+1)}{2(2S+1)} \sum_{fi} |T_{fi}^{(J)}|^2$$

ahol  $J$  a közbenső állapot,  $S$  pedig a target mag teljes impulzusmomentuma.

A vázolt eljárást a továbbiakban a  $C^{12}$  magon történő rugalmas neutronszerzés leírására alkalmazzuk.

### Rugalmas neutronszerzés a $C^{12}$ magon

Ha az előzőekben részletezett módszert közepes vagy méginkább nehéz magok esetére kívánjuk alkalmazni, akkor csupán azt várhatjuk, hogy a hatáskeresztmetszetnek az egy kvázirészecske állapot sajátosságait tükröző durva, és a három kvázirészecske állapotok kialakulásával kapcsolatos féldurva szerkezetéről kapunk felvilágosítást. A hatáskeresztmetszet finom szerkezete rejtve marad, minthogy a tényleges compound állapotok általában jóval komplikáltabbak a számítás során tekintetbe vett hídfő állapotoknál. Kis gerjesztési energia, illetve alacsony tömegszám esetén azonban, a rendszer kis szabadsági fokszámánál fogva a hídfő állapotok eléggé megközelíthetik a tényleges compound állapotokat, ezért remény van arra, hogy a hatáskeresztmetszetnek a részletes szerkezetére kapunk felvilágosítást. Figyelmünket tehát a könnyű magokra érdemes fordítani. Lemmer és Shakin [4] a  $N^{15}$  magon való neutronszerzést vizsgálták az előzőekben vázolt eljárás segítségével és elég ésszerű eredményeket kaptak. A módszer teljesítőképességének ellenőrzése végett érdemesnek látszik a könnyű magok között minden szempontból az egyik legérdekesebb és az egyik legtöbbet vizsgált magnak a  $C^{12}$ -nek az esetét részletesen elemezni.

A három kvázirészecske hídfő állapot koncepcióját a legesztétikusabban tükröző módszer az lenne, hogy a  $C^{12}$  alapállapotának megfelelő  $(1s_{1/2})^4(1p_{3/2})^8$  konfigurációt „vákuum állapotnak” tekintenénk és két részecske, illetve egy lyuk keltő operátor alkalmazásával generálnánk a  $C^{13}$   $Q\Psi$  alterének megfelelő állapotokat. Easlea [5] munkájából kiderül azonban, hogy ez az eljárás önmagában, bizonyos fenomenologikus kiegészítése nélkül, nem képes helyesen számot adni a  $C^{13}$  valószínű tulajdonságairól. Éppen ezért célszerűnek látszik a Barker [6] által is követett utat választani, alapul véve a Lane [7] féle modellt, amely a  $C^{13}$  mag alacsonyan gerjesztett páros paritású állapotainak leírására ad egy elég realiztikusnak tűnő és egyben igen könnyen kezelhető módszert.

A Lane-féle modell szerint a  $C^{13}$  páros paritású állapotai első közelítésben úgy jönnek létre, hogy a  $C^{12}$  alapállapotához, illetve a 4,433 MeV-nél fekvő, minden valószínűség szerint erősen deformált,  $2^+$  spinű és paritású állapotához csatolódik a  $2s-1d$  héjban helyet foglaló utolsó neutron. Második közelítésként figyelembe vehetjük az utolsó neutronnak az alap, illetve gerjesztett állapotban levő törzs nukleonjaival való individuális kölcsönhatását.

Ennek az egyszerű modellnek többek között az az előnyös tulajdonsága, hogy a  $Q\Psi$  alter bázisfüggvényeinek megkonstruálása teljesen egyszerűen történhet, mert nem kell mást tenni, mint a gerjesztett állapothoz tartozó hullámfüggvényt vektorcsatolni az  $1d_{3/2}$   $1d_{5/2}$  és a  $2s_{1/2}$  egy-részecske függvényekkel, majd ezt követően

elvégezni az antiszimmetrizálást. A  $C^{12}$  alap és első gerjesztett állapotának leírására az egyszerűség kedvéért az  $(1s)^4 (1p)^8$  konfiguráció [444] particióval jellemzett ( $S=0$ ,  $T=0$ )  $L=0$ , illetve  $L=2$  impulzusmomentumhoz tartozó függvényeit használtuk. A radiális hullámfüggvényeket a megfelelő oszcillátor függvényekkel közelítettük, a „rugó állandót”  $b = 1.67$ -nek választva. Az utolsó neutron hullámfüggvényeit ezen két függvényhez csatolva és antiszimmetrizálva a

$$\begin{aligned} &\Phi(0^{1/2} | 1/2), & \Phi(0^{3/2} | 3/2), & \Phi(0^{5/2} | 5/2), \\ & & \Phi(2^{1/2} | 3/2), & \Phi(2^{1/2} | 5/2), \\ &\Phi(2^{3/2} | 1/2), & \Phi(2^{3/2} | 3/2), & \Phi(2^{3/2} | 5/2), & \Phi(2^{3/2} | 7/2), \\ &\Phi(2^{5/2} | 1/2), & \Phi(2^{5/2} | 3/2), & \Phi(2^{5/2} | 5/2), & \Phi(2^{5/2} | 7/2), & \Phi(2^{5/2} | 9/2) \end{aligned}$$

bázisrendszert nyerjük, ahol a  $(J_0 j | J)$  szimbólumban  $J_0$  a  $C^{12}$ ,  $j$  az utolsó neutron,  $J$  pedig a  $C^{13}$  teljes impulzusmomentumát jelenti. Az első sor elhagyásával éppen a  $Q\Psi$  altér bázisrendszerét nyerjük.

Az adott bázisrendszerben képezve a héjmodell  $H^{HM}$  Hamilton-operátorának matrixát a következő kifejezést kapjuk:

$$\langle \Phi_{(J_0 j | J)} | H^{HM} | \Phi_{(J'_0 j' | J)} \rangle = \delta_{J_0 J'_0} \delta_{jj'} [E_{J_0} + E_j] + \langle \Phi_{(J_0 j | J)} | V_R | \Phi_{(J'_0 j' | J)} \rangle$$

A diagonális tagban szereplő mennyiségeket az

$$\begin{aligned} E_{J_0} &= E_0 \delta_{J_0 0} + E_2 \delta_{J_0 2} = E_0 + (E_2 - E_0) \delta_{J_0 2} \\ E_j &= \left[ E_s \delta_{j^{1/2}} + \left( E_d + \frac{l}{2l+1} \xi \right) \delta_{j^{3/2}} + \left( E_d - \frac{l+1}{2l+1} \xi \right) \delta_{j^{5/2}} \right] = \\ &= E_d + (E_s - E_d) \delta_{j^{1/2}} + \frac{2}{5} \xi \delta_{j^{3/2}} - \frac{3}{5} \xi \delta_{j^{5/2}} \end{aligned}$$

összefüggések definiálják, ahol  $E_2 - E_0 = 4,433$  MeV a  $C^{12}$  első gerjesztett, illetve alapállapotának energiakülönbsége. A spin-pálya kölcsönhatásra jellemző  $\xi$  állandót az  $O^{17}$  esetén észlelt  $E_{3/2} - E_{5/2} = 5,08$  MeV nivótávolságnak megfelelően választottuk meg:  $\xi = 5,08$  MeV. Az  $E_{2s} - E_{1d} = \Delta E$  energiakülönbséget oly módon határoztuk meg, hogy a  $H^{HM}$  Hamilton-operátornak a teljes bázisrendszerben képezett matrixát diagonalizáltuk, és megköveteltük, hogy a  $J=1/2$  és  $J=5/2$  impulzusmomentumhoz tartozó legkisebb sajátértékek különbsége, a kísérletileg  $-1,86$  MeV-nél, illetve a  $-1,09$  MeV-nél megfigyelt kötött állapotok energiakülönbségével egyezzek meg. Ily módon  $\Delta E$ -re a  $-1,35$  MeV érték adódott.  $E_0$  és  $E_d$  jelen esetben érdektelen konstansok.

A  $V_R$  maradék-kölcsönhatás operátorát megintcsak az egyszerűsége törekedve választottuk meg:

$$V(x_0 x_k) = -4\pi b^3 v_0 (0,865 + 0,135 \vec{\sigma}_0 \vec{\sigma}_k) \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_k)$$

ahol  $b = 1,67$  F,  $v_0 = 8,5$  MeV, [8].

A  $QHQ$  operátor matrixa csupán annyiban különbözik a  $H^{HM}$  héjmodell operátor matrixától, hogy az utóbbiból elhagyjuk a  $\Phi(0j|J)$  típusú bázisfüggvé-



nyekkel képezett elemeket:

$$\langle \Phi_{(2j' | J)} | QHQ | \Phi_{(2j | J)} \rangle = \delta_{j'j} [4,433 - 1,07\delta_{j^{3/2}} + \\ + 2,032\delta_{j^{3/2}} - 3,048\delta_{j^{5/2}}] + \langle \Phi_{(2j' | J)} | V_R | \Phi_{(2j | J)} \rangle$$

Összehasonlítás kedvéért az 1. ábrán feltüntettük

1. a  $H^{HM}$  operátor diagonális matrix elemeit,
2. a  $H^{HM}$  operátor sajátértékeit,
3. a  $QHQ$  operátor sajátértékeit, és végül
4. a *Barker* által kapott energia spektrumot.

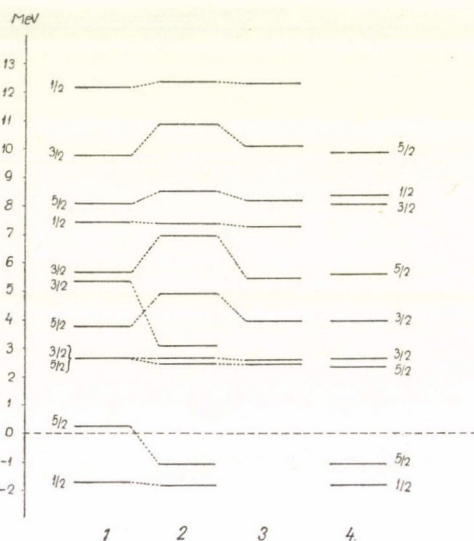
A  $H^{HM}$  energia spektruma kvalitatíve nem sokban különbözik a *Barker* munkájában szereplő energia spektrumtól, a kvantitatív eltérést az okozza, hogy *Barker* véges hatótávú maradék-kölcsönhatással számolt. Mi gyakorlati okokból választottuk a delta kölcsönhatást, arra törekedve, hogy a  $\langle Q\Phi | QHP | P\Psi \rangle$  típusú matrixelemek kiszámítása ne okozzon túl sok bonyodalmat. Amint az összehasonlítás mutatja, a maradék-kölcsönhatásnak  $\delta$  potenciállal való közelítése nem módosítja lényegesen az energia spektrumot. A  $QHQ$  spektrumában a legalacsonyabban fekvő  $J = 1/2, 3/2, 5/2$  nívók hiánya a bázisrendszer megcsonkításának természetes következménye.

Megjegyezzük, hogy az itt követett eljárás sokban emlékeztet a *MacDonald* által újabban javasolt módszerre [9]. *MacDonald* szerint a  $QHQ$  diszkrét energia spektrumát szemléletesen a következőképpen képzelhetjük el. A rendszer teljes energiája megoszlik a  $C^{12}$  törzs és az utolsó neutron között. Minthogy a törzs gerjesztéséhez  $\varepsilon_1$  energia szükséges, mindaddig amíg  $E < \varepsilon_1$  az utolsó neutron kötött állapotban lesz a gerjesztett törzs körül, lévén az energiája negatív:  $E - \varepsilon_1 < 0$ . Ha nem lenne energiacsere a gerjesztett törzs és az utolsó neutron között, azaz, ha a  $\langle Q\Psi | QHP | P\Psi \rangle$  típusú matrixelemek mind eltűnnének, akkor a  $QHQ$  diszkrét saját állapotai a rendszernek valódi stacionér állapotai lennének, annak ellenére, hogy a rendszer teljes energiája pozitív.

A  $QHQ$  operátor diagonalizálásával, rendelkezésünkre állnak az  $En$  energia sajátértékek és a  $\Phi_n$  sajátfüggvények, amelyek a  $\Phi_{(J \cdot j | J)}$  bázisfüggvények

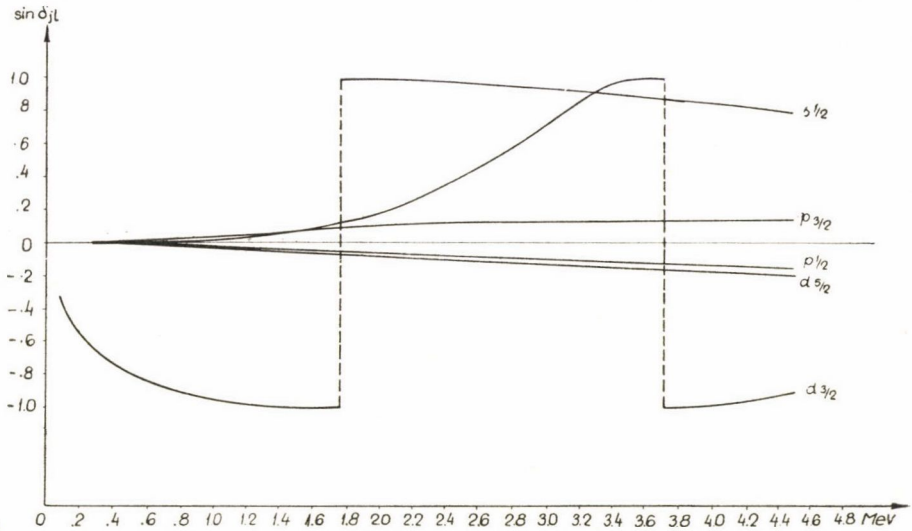
$$\Phi_n^{(J)} = \sum_{J_0 j} C_{(J_0 j | J)}^n \Phi_{(J_0 j | J)}$$

lineárkombinációiként állnak elő. A  $T$  matrixelemek, illetve a  $\Gamma$  és  $\Delta$  matrix elemei-



1. ábra. A  $C^{13}$  energia spektruma. 1. A héj modell Hamilton-operátor diagonális matrix elemei. 2. A héj modell Hamilton-operátor sajátértékei. 3. A  $QHQ$  operátor sajátértékei. 4. A *Barker* által kapott energia spektrum.

nek meghatározásához szükségünk van az optikai potenciált tartalmazó egy-részecske Schrödinger-egyenlet reguláris  $v_{cE}(r)$  és irreguláris  $w_{cE}(r)$  megoldásaira. Ehhez először is a centrális potenciál  $V_c$  és a spin-pálya kölcsönhatás  $V_{s0}$  erősségét kell helyesen megválasztani. A Lane-modell szellemének megfelelően feltételeztük, hogy a  $C^{13}$   $-1,86$  MeV-nél fekvő  $1/2^+$  spinű és paritású állapota a  $C^{12}$  által létrehozott potenciáltérben mozgó neutron kötött  $2s_{1/2}$  állapotának felel meg. A  $V_c$  értékét úgy választottuk meg tehát, hogy a Saxon—Wood-potenciállal felírt Schrö-



2. ábra. Parciális fáziseltolódások.

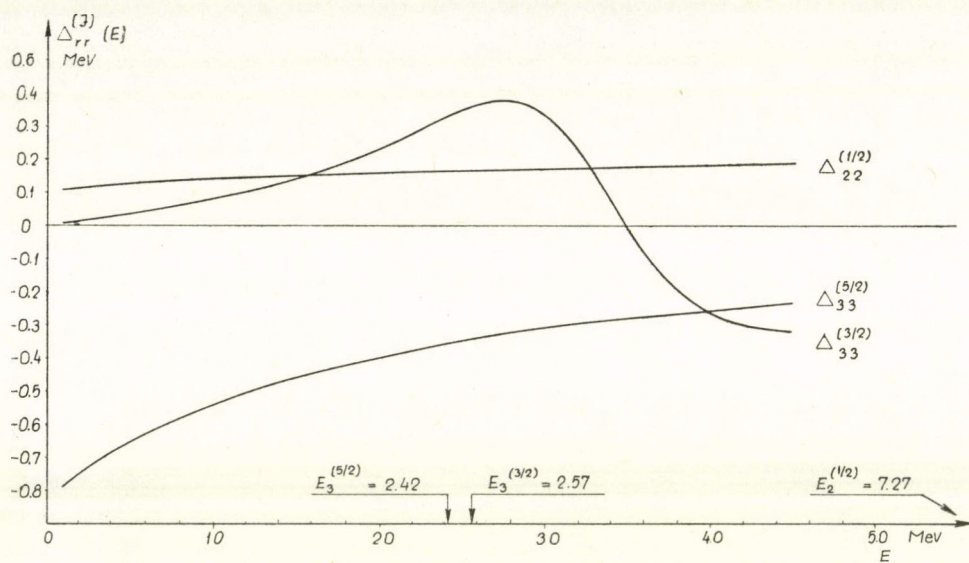
dinger-egyenlet  $2s_{1/2}$  állapotának energia sajátértéke éppen  $-1,86$  MeV legyen. Ilyen módon  $V_c$  értékére, amelyet a Gunn-féle iterációs eljárással határoztunk meg,  $V = -57,6$  MeV adódott.  $V_{s0}$  értékét a  $6,4-8,9$  MeV intervallumban variáltuk, megkeresve azt az értéket, amelynél a  $C^{12}(n, n)C^{12}$  kísérletileg meghatározott hatáskeresztmetszetében  $3,25$  MeV környékén jelentkező széles rezonancia éppen egybeesik a számított teljes szórási hatáskeresztmetszet  $d^{3/2}$  típusú egy-részecske rezonanciájával. A legjobb illeszkedést  $V_{s0} = 7,4$  MeV esetén találtuk. A 2. ábrán a  $V_c = -57,6$  MeV,  $V_{s0} = 7,4$  MeV,  $R = 2,86$  F,  $a = 0,65$  F paraméterekkel jellemzett Saxon—Wood potenciál hatására létrejövő parciális fáziseltolódás értékét tüntettük fel, mint a tömegközépponti energia függvényét. A szórási hatáskeresztmetszethez csak az  $s$  és  $d$  hullámok adnak lényeges járulékot.

A  $\Gamma_{rs}$  matrixelemek meghatározása a  $v_{cE}(r)$  reguláris megoldás ismeretében teljesen egyszerű. Bevezetve az általunk használt reprezentáció indexeit ( $c \equiv (J_0 j | J)$ ) a meghatározott  $J$  teljes impulzusmomentumhoz tartozó  $\Gamma_{rs}^{(J)}(E)$  matrixelem a következő alakba írható:

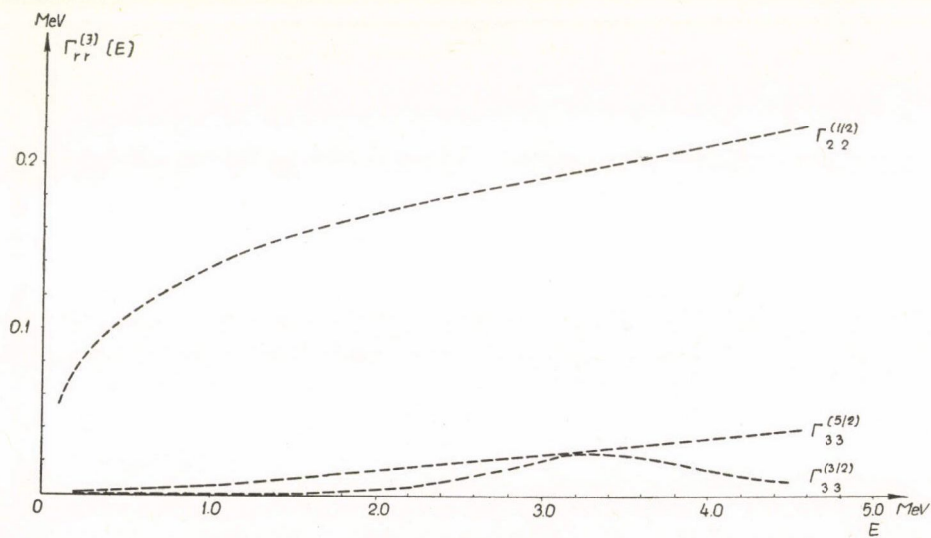
$$\Gamma_{rs}^{(J)}(E) = 2\pi \sum_{J_0 j} \int dr_0 dr'_0 r_0 r'_0 \langle \Phi_r^{(J)} | QHP | (J'_0 j' | J); r_0 \rangle$$

$$v_{j'E}(r_0) v_{j'E}(r'_0) \langle (J'_0 j' | J); r'_0 | PHQ | \Phi_s^{(J)} \rangle$$





3. ábra. A  $\Delta$  nível eltolódásnak a legalacsonyabban fekvő állapotokhoz tartozó diagonális matrix elemei



4. ábra. A  $\Gamma$  nivószélességnek a legalacsonyabban fekvő állapotokhoz tartozó diagonális matrix elemei

Minthogy a  $C^{12}$  alapállapotának spinje  $J=0$ , azért  $J=j'$ , a  $J'_0$  és  $j'$ -re való összegzés egy tagra redukálódik. A  $\Phi_r^{(J)}$  sajátfüggvényeket a  $\Phi_{(2j|J)}$  bázisfüggvényekkel kifejezve írhatjuk, hogy

$$\Gamma_{rs}^{(J)}(E) = 2\pi \sum_{j'j''} C_{(2j'|J)}^r C_{(2j''|J)}^s \langle \Phi_{(2j'|J)} | V_R | \Phi_{(0j|J)}^v \rangle \langle \Phi_{(0j|J)}^v | V_R | \Phi_{(2j''|J)} \rangle$$

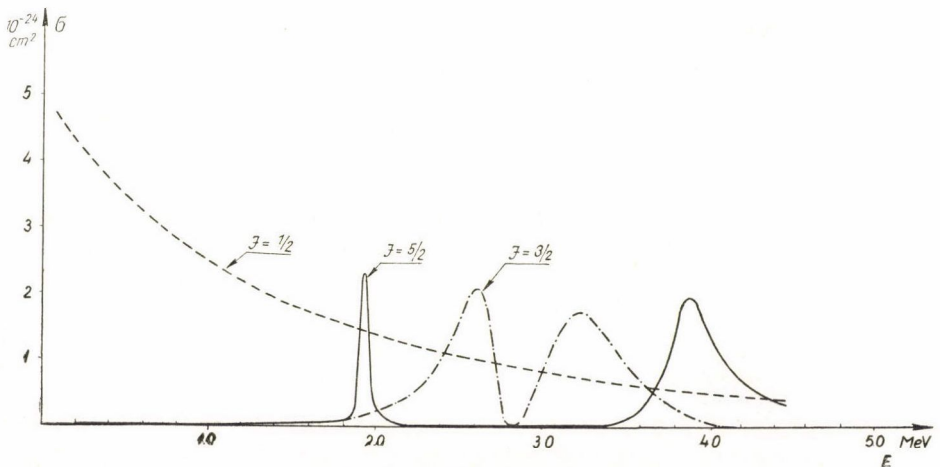
Itt  $\Phi_{(0j|J)}^v$  annyiban különbözik a  $v$  index nélküli  $\Phi_{(0j|J)}$ -től, hogy a radiális  $u_j(r_0)$  oszcillátorfüggvényt a  $v_{jE}(r_0)$  reguláris megoldással helyettesítjük. Hasonlóképpen

$$\begin{aligned} \Delta_{rs}^{(J)}(E) = & -\pi \sum_{j'j''} C_{(2j'|J)}^r C_{(2j''|J)}^s \int dr_0 dr'_0 r_0 r'_0 \langle \Phi_{(2j'|J)} | V_R | (0j|J); r_0 \rangle \\ & \{v_{jE}(r_0) w_{jE}(r'_0) \theta(r_0 r'_0) + v_{jE}(r'_0) w_{jE}(r_0) [1 - \theta(r_0 r'_0)]\} \\ & \langle (0j|J); r'_0 | V_R | \Phi_{(2j''|J)} \rangle \end{aligned}$$

Itt is bevezethetjük az előbb definiált  $\Phi_{(0j|J)}^v$  illetve a hasonló  $\Phi_{(0j|J)}^w$  függvényeket csak a kettős integrál kiszámításánál ügyelni kell arra, hogy  $\Phi_{(0j|J)}^v$  és  $\Phi_{(0j|J)}^w$   $r_0 = r'_0$  esetén szerepet cserélnek. A 3. és 4. ábrán illusztrációképpen bemutatjuk az energia függvényében a  $\Delta$  és  $\Gamma$  diagonális matrix elemeit. Amint jól látható mind  $\Delta$ , mind  $\Gamma$  matrix elemei az energiának lassan változó függvényei, csupán az egy-részecske rezonancia közelében mutatnak gyors változást.

### Eredmény és következtetések

Az előbbieken vázolt eljárással meghatároztuk a lehetséges  $J$  impulzusmomentum értékekhez tartozó  $\sigma^{(J)}$  (5. ábra) illetve a teljes  $\sum_J \sigma^J$  szórási hatáskeresztmetszetet, mint a tömegközépponti energia függvényét a 0,1–4,5 MeV energia



5. ábra. Parciális hatáskeresztmetszetek



közben, ahol az elhanyagolható neutronbefogáson kívül egyedül csak rugalmas szórás fordulhat elő.

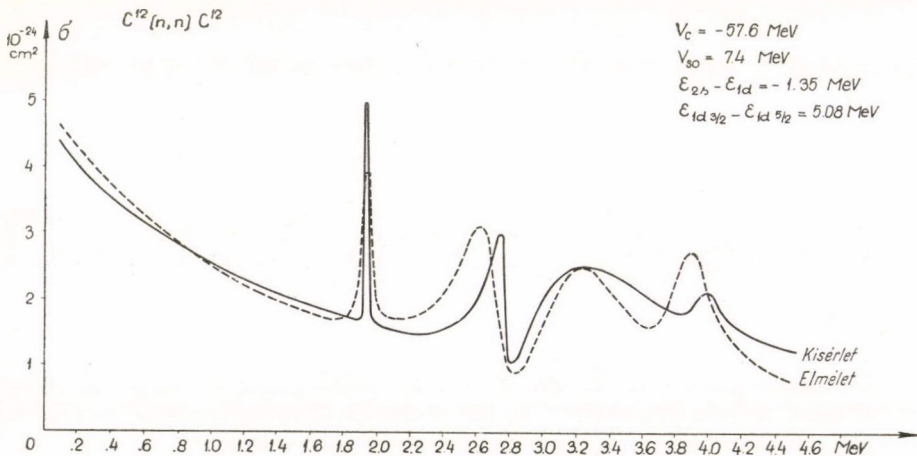
Érdemesnek látszik megjegyezni a következőket:

A  $\Phi_{(2^{1/2}|3/2)}$  és  $\Phi_{(2^{1/2}|5/2)}$  bázisfüggvénnyel leírt állapotok elfajultak, pontosabban a velük képzett diagonális matrixelemek azonosak, ez jól látható az 1. ábrán. A  $QHQ$  operátor diagonalizálásával ez az elfajulás feloldódik ugyan, de a nívó felhasadás igen kismértékű a  $J=5/2$  impulzusmomentumhoz tartozó állapot csupán 150 KeV-tal kerül a 2,57 MeV-nél fekvő  $J=3/2$  impulzusmomentummal jellemzett nívó alá.

A Barker által kapott nívó felhasadás mértéke valamivel nagyobb ugyan de még mindig igen kicsiny (lásd 1. ábra) a megfelelő kísérletileg észlelt rezonancia nívók távolságához képest, amely 800 KeV nagyságrendű. Figyelembe kell azonban vennünk, hogy a  $QHQ$  sajátértékei és általában a héjmodell segítségével kapott energiaértékek csak akkor felelnének meg közvetlenül a rendszer karakterisztikus energiaértékeinek, ha nem lenne csatolás a  $\Phi_n$  diszkrét és a  $\chi_{cE}^{(+)}$  folytonos állapotok között. Minthogy azonban a maradék kölcsönhatás átmenetet létesít ezen állapotok között, azért egyrészt nívókiszélesedés, másrészt nívóeltolódás következik be. A 3. ábráról kvalitatíve leolvasható, hogy a  $J=3/2$  állapothoz tartozó nívóeltolódás 3,5 MeV alatt pozitív, ugyanakkor a  $J=5/2$  állapot esetén negatív. A  $QHQ$  két közel elfajult állapota a hatáskeresztmetszetben egymástól nagy mértékben eltávolodott rezonancia nívó formájában jelentkezik.

Minthogy a széles  $d_{3/2}$  egy-részcseke rezonancia a vizsgált energiatartomány első részétől eltekintve mindenütt erősen érezteti a hatását, az említett gyenge csatolás esetének megfelelő  $(A^{-1})_{mn} \approx \frac{1}{A_{mm}} \delta_{mn}$  közelítés megengedhetetlen. A 6. ábrán összehasonlítottuk az elméleti és a kísérleti hatáskeresztmetszetet; az egyezés elég jónak mondható.

Nagyon valószínűnek látszik, hogy az eltérést még sok tekintetben lehetne csökkenteni a használt paraméterek ügyes megválasztásával. Mi azonban arra töre-



6. ábra. A teljes rugalmas szórási hatáskeresztmetszet

kedtünk, hogy a paraméterek megválasztása mennél kevésbé legyen önkényes. A paraméterek kötöttségének és konzisztenciájának kihangsúlyozása végett érdemesnek látszik megjegyezni a következőket.

Az egész számítás során csupán három olyan paramétert használtunk, amelyet nem közvetlenül az irodalomból vettünk át; ezek az optikai potenciál  $V_c$  és  $V_{s0}$  paraméterei, valamint a  $\Delta E = E_s - E_d$  energiakülönbség.

A  $\Delta E$  paraméter megválasztásánál a két legalacsonyabban fekvő, páros paritású, kötött állapot energia különbségét illesztettük a kísérleti értékhez, azaz az általánosan elfogadott módszert követtük.

A  $V_c$  völgymélység megválasztásánál követett módszert nevezetesen a  $2s_{1/2}$  állapot energia sajátértékének a kísérleti  $-1,86$  MeV értékhez való illesztése teljesen indokoltnak tűnik, minthogy a héjmodell Hamilton-operátor diagonalizálása során kiadódott, hogy a legmélyebben fekvő  $1/2$  impulzusmomentumú állapot 98%-os súllyal tartalmazza az alapállapotú targetmaghoz kötött  $2s_{1/2}$  állapotú neutronok megfelelő  $\Phi_{(0^{1/2}1^{1/2})}$  állapotot.

Az optikai potenciál  $V_{s0}$  paramétere az egyetlen, amelyet a kísérleti és elméleti hatáskeresztmetszet közvetlen összehasonlításával határoztunk meg, a  $d_{3/2}$  egy-részecske rezonancia maximumhelyének illesztésével. A kapott  $V_{s0} = 7,4$  MeV érték elfogadhatónak tűnik, ha figyelembe vesszük a következőket. A spin pálya kölcsönhatás intenzitására jellemző paraméter két helyen lép be a számításba. Egyrészt mint az optikai potenciálban szereplő  $V_{s0}$  paraméter, másodsor pedig a  $QHQ$  operátor diagonális tagját jellemző  $\xi = E_{1d^{3/2}} - E_{1d^{5/2}}$  paraméter alakjában.  $\xi$  értékét, amint már említettük, az  $O^{17}$  páros paritású állapotaira vonatkozó kísérleti adatokból vettük:  $\xi = 5,08$  MeV.

Meghatározva a  $V_c = -57,6$  és  $V_{s0} = 7,4$  paraméterekkel jellemzett potenciál esetén kialakuló  $1d_{5/2}$  kötött állapotenergia sajátértékét  $-2,16$  MeV-et kapunk. Az  $1d_{3/2}$  állapot a folytonos energiatartományba esik és a  $d_{3/2}$  egy-részecske rezonancia maximuma közelítőleg  $3,6$  MeV-nél fekszik. Az  $E_{d^{3/2}} - E_{d^{5/2}}$  energiakülönbség tehát  $5,76$  MeV, ami csupán 10%-ban különbözik a  $\xi = 5,08$  MeV értéktől. A  $V_{s0} = 7,4$  MeV tehát ésszerű értéknek tekinthető.

Kvalitatíve teljesen világos, hogy ha a maradék kölcsönhatás, amely az átmenetet létrehozza a  $\Phi_n$  „compound” állapotok és a  $\chi_{cE}^{(+)}$  szórási állapotok között gyenge, akkor szórási folyamatot alapvetően az átlagpotenciál determinálja, következésképp a hatáskeresztmetszetben az egy-részecske rezonanciák dominálnak. Másrészt viszont, ha a maradék kölcsönhatás nagyon erős, akkor az átlagpotenciál által megszabott egy-részecske állapotok teljesen szétroncsolódnak és a hatáskeresztmetszet fölött a compound rezonanciák veszik át az uralmat.

Kvantitatív tájékozódás végett megvizsgáltuk, hogy mennyire módosul a hatáskeresztmetszet a maradék kölcsönhatás erősségének megváltoztatása következtében. A maradék kölcsönhatás  $v_0$  erősségét az eredeti  $8,5$  MeV-ről  $10$  MeV-re növeltük és valamennyi számítást megismételtük. A  $H^{HM}$  és  $QHQ$  spektruma kvalitatíve változatlan maradt, csupán a  $\Delta E$  értéke változott meg  $-1,55$  MeV-ről  $-1,07$  MeV-re.

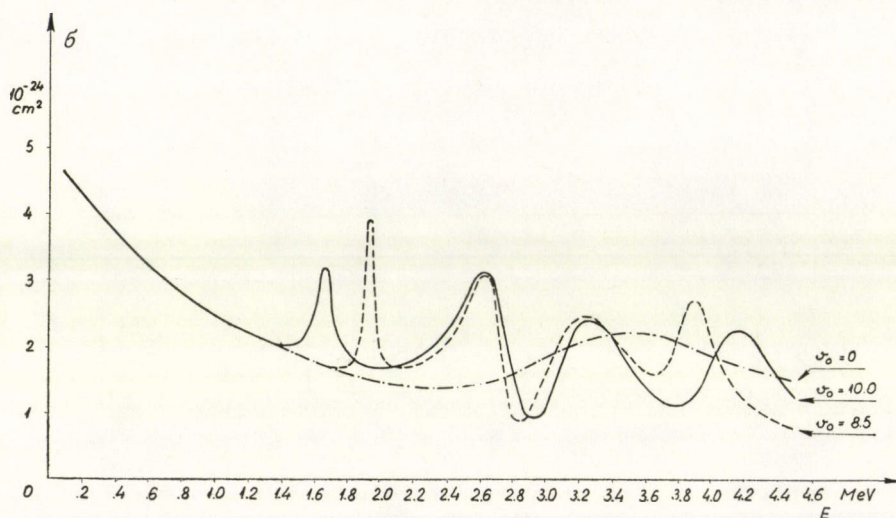
A hatáskeresztmetszetben bekövetkezett változást a 7. ábrán tanulmányozhatjuk. A várakozásnak megfelelően az egy-részecske rezonancia szélessége lecsökkent és valamennyi compound rezonancia szélessége megnövekedett.

A fentiekben követett módszer részletei és az alkalmazott közelítések ellen természetesen számos kifogás emelhető: A Lane-féle modell elméleti szempontból



túlzottan fenomenologikus jellegű. A feltételezett maradékkölcsönhatás nem elég realisztikus, a  $QHQ$  sajátállapotainak meghatározása során a tömegközéppont mozgását nem küszöböltük ki, a  $g_{cE}(r_0 r'_0)$  radiális Green-függvény bevezetésekor az antiszimmetria követelményének csak részlegesen tettünk eleget stb.

Mindezen fogyatékok ellenére (és feltehetően azon kifogások ellenére is, amellyel az olvasó kiegészíti az előző felsorolást) a kapott eredmények alapján egy következtetés biztosan levonható:



7. ábra. A teljes rugalmas szórási hatáskeresztmetszetnek a  $v_0$  maradék kölcsönhatás erősségétől való függése

A Feshbach-féle magreakcióelmélet keretébe beépített háromkvázi-részecskes modell kielégítően jó közelítést szolgáltat a könnyű magok dinamikus tulajdonságainak elemzéséhez.

\*

Befejezésül szeretném hálásan megköszönni *Aage Bohr*, *Gerry Brown* és *Ben Mottelson* professzorok támogatását és a szíves vendéglátást, amelyben részem volt a koppenhágai Elméleti Fizikai Intézetben.

Ugyancsak köszönettel tartozom *dr. Carl Shakin*-nak, aki hasznos ötletekkel és tanácsokkal segítette munkámat, valamint *dr. John Gunn*-nak, aki a GIER számítógép programozásának és kezelésének elsajátításához nyújtott értékes segítséget.

#### IRODALOM

- [1] *H. Feshbach*, Ann. Phys. N. Y. 5, 357, 1958.
- H. Feshbach*, Ann. Phys. N. Y. 19, 287, 1962.
- C. Shakin*, Ann. Phys. N. Y. 22, 373, 1963.
- C. Shakin*, Ann. Phys. N. Y. 22, 54, 1963.
- H. Feshbach*, *L. Estrada*, Ann. Phys. N. Y. 23, 123, 1963.
- R. H. Lemmer*, Phys. Letters 4, 205, 1963.

- [2] *A. K. Kerman, L. S. Rodberg, J. E. Young*, Phys. Rev. Letters *11*, 422, 1963.
- [3] *B. Block, H. Feshbach*, Ann. Phys. N. Y. *23*, 47, 1963.
- [4] *R. H. Lemmer, C. Shakin*, Ann. Phys. N. Y. (közlés alatt).
- [5] *B. Easlea*, Phys. Letters *1*, 163, 1962.
- [6] *F. C. Barker*, Nucl. Phys. *28*, 96, 1961.
- [7] *A. M. Lane*, Rev. Mod. Phys. *32*, 519, 1960.
- [8] *G. E. Brown, L. Castillejo, J. A. Evans*, Nucl. Phys. *22*, 1, 1961.
- [9] *V. M. MacDonald*, Nucl. Phys. *54*, 393, 1964.
- [10] *G. E. Brown, J. H. Gunn, P. Gould*, Nucl. Phys. *46*, 598, 1963.
- [11] *A. M. Lane, R. G. Thomas, E. P. Wigner*, Phys. Rev. *98*, 693, 1955.



# KÍSÉRLETI TAPASZTALATOK EGY LASSÚ-GYORS RENDSZERŰ, $10^{-8}$ SEC TARTOMÁNYBAN MŰKÖDŐ KOINCIDENCIA KÖRREL KAPCSOLATBAN\*

MÁTHÉ GYÖRGY

MTA Atommag Kutató Intézete, Debrecen

Az MTA Debreceni Atommag Kutató Intézetében hosszabb idő óta alkalmazunk magfizikai vizsgálatokhoz koincidencia köröket. Ebben a dolgozatban ismertetjük az alkalmazott berendezés felépítését, valamint a vele szerzett koincidencia mérési tapasztalatokat. Ezen keresztül olyan általános koincidencia mérési problémákkal foglalkozunk, mint a koincidencia berendezés paramétereinek; késleltetés, feloldási idő optimális megválasztása, — normál és sum koincidencia mérésekkel kapcsolatos problémák. Végül a koincidencia kör néhány speciális felhasználási területét ismertetjük mint részecske identifikálás jelalak diszkriminációval vagy egymásra ülő (pile-up) impulzusok kiszűrése amplitúdó spektrumokból.

## Bevezetés

A korszerű magfizikai méréseknél a koincidencia köröket ma már kiterjedten alkalmazzák. Legáltalánosabban események egyidejűségének kimutatására használják, valamint igen rövid idők mérésére.

Általános törekvés, hogy a koincidencia körök műszaki tulajdonságait — elsősorban feloldóképességét minél kedvezőbbé tegyék. Ez számos alapvető kérdést vet fel, amivel úgy a műszer tervezőjének, mint a készülék alkalmazójának számolnia kell. Ezeknek a problémáknak ismerete viszont lehetővé teszi, hogy a műszert sokoldalúan felhasználhassuk, és mindig az optimális paraméterek mellett üzemeltessük.

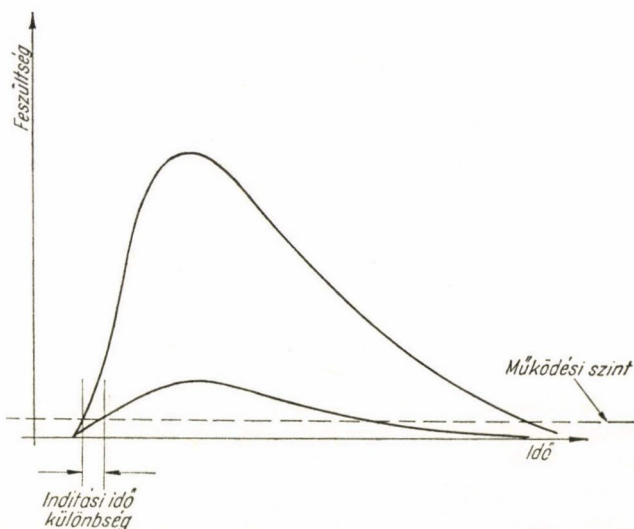
## Általános problémák koincidencia körök működésével kapcsolatban

Valamennyi koincidencia berendezés lényegében olyan berendezés, amelyiknek ha a bemeneteire egyidőben adunk be impulzusokat, akkor a kimenetén jel jelenik meg. Ha a bemeneten az impulzusok nem egyszerre jelennek meg, akkor a kimenő impulzus elmarad. A kör felbontóképességét a bemeneteken alkalmazott impulzusok hosszúsága döntően befolyásolja. Könnyen belátható, ha a bemenetre négyzetleges impulzust adunk, akkor nem csak a két impulzus pontos fedése esetén fog megjelenni a kimeneten jel, hanem ezek részbeni fedése esetén is. Pontosabban, ha a bemenő jelek egyforma hosszúak és időtartamuk  $T$ , akkor  $2T$  időn belül érkező jelek esetén mindig kapunk koincidenciát. Ezután kézenfekvő, hogy azáltal javíthatjuk a berendezés felbontóképességét, ha a bemenő jelek hosszát csökkentjük. Megjegyezzük, hogy a felbontóképesség javításának más módja is van, de azokra nem kívánunk kitérni.

\* Érkezett 1964. nov. 7.

A koincidencia kör számára az impulzusokat végső fokon a részecske detektorból kapjuk. Ezek a jelek gyors koincidencia kör vezérlésére közvetlenül alkalmatlanok. Túl szélesek, nem beszélve arról, hogy amplitúdójuk a detektált részecske energiájától függően más és más. A detektorok jeleit elsősorban a spektroszkópiai analízis céljainak megfelelően szokták kialakítani, mivel ez döntő fontosságú az energia-felbontás szempontjából.

Tipikus detektorjelet láthatunk az 1. ábrán.



1. ábra. Magfizikai detektorok tipikus jelalakjai. A nagyobb impulzus hamarabb hozza működésbe a koincidencia kört mint a kicsi, jólehet mind a kettő egyszerre indul

A detektor viszonylag hosszú jeleit felhasználhatjuk gyors koincidencia kör vezérlésére, ha nem az eredeti jelet, hanem a jelnek egy olyan részét használjuk fel, ami legjobban reprezentálja a részecske detektálásának időpillanatát  $p^1$ . az impulzus legelejét, és ebben a pillanatban kialakítunk egy rövid, jól definiált alakú, a koincidencia kör vezérlésére alkalmas jelet.

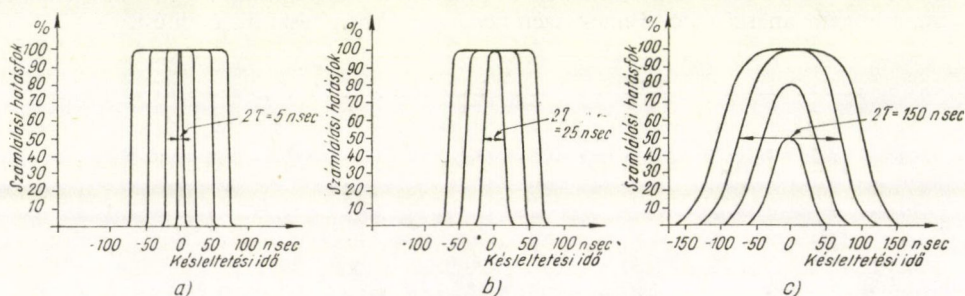
Az impulzus induló szakasza megfelelő formálás után átalakítható  $10^{-7} - 10^{-9}$  sec hosszúságú jelekké. Koincidencia kört igen jó feloldó idővel lehet készíteni,  $10^{-12}$  sec tartományt is elértek már [1]. Azonban ezt a sebességet kihasználni a mai leggyorsabb detektorokkal sem lehet. Leggyorsabbak a szcintillációs detektorok, ezeknél a korlátot a multiplier anódján megjelenő impulzusok időbizonytalansága okozza (jitter). Az időingadozás nagyságrendje  $10^{-9}$  sec.

A sebességet korlátozza az a további körülmény is, hogy minden részecske detektor véges emelkedési idejű impulzusokat szolgáltat különböző amplitúdó mellett. Ugyanis bármilyen jelformáló kört alkalmazunk is, amikor az eredeti impulzust feldolgozzuk, mindig lesz egy véges küszöbfeszültség, ami fölé emelkedő impulzusokat tudjuk csak feldolgozni. Ez pedig azt jelenti, hogy ha koincidenciát akarunk kimutatni egy nagy és egy kis jel között, nehézségek fognak fellépni, mivel a nagy



jel hamarabb indítja a koincidencia kört, mint a kicsi. Jóllehet mind a két jel egyszerre indul (1. ábra). A nehézségeken javítani lehet, ha a küszöb feszültséget lejjebb szállítjuk. Felszámolni pedig akkor lehetne, ha a küszöb feszültség nulla lenne.\* A küszöb feszültség minden határon túl való csökkentését pedig korlátozza a detektor zaja pl. sötét áram és egyéb zajforrások. Az egész jelenség rendszerint a koincidencia spektrumok alacsony energiájú részének eltorzulásában (impulzusszám veszteség) érezteti hatását. Ezzel a problémával a következőkben részletesen foglalkozunk.

Számos koincidencia mérésnél felmerül az a kíváncsi, hogy szükség esetén megváltoztassuk a kör feloldó idejét. Ennek egyik lehetséges módja, hogy a koincidencia egység kimenő jeleit megintegráljuk és egy diszkriminátor segítségével nagyság szerint válogatjuk [3]. Kis feloldó időt kapunk abban az esetben, ha a diszkriminátoron nagy előfeszültséget alkalmazunk, mert ilyenkor fedi egymást tökéletesen a két bemenő jel, ennek eredményeképpen lesz elég hosszú a kimenő jel ahhoz, hogy az integrálás után elérje a magas diszkriminációs szintet. Alacsonyabb diszkriminációs feszültségek esetén a feloldó idő nagyobb lesz, mert ekkor a bemenő jelek részbeni fedése is elegendő ahhoz, hogy a diszkriminátor működésbe lépjen. Így a diszkriminátor előfeszültségének szabályozásával lényegében a koincidencia felbontóképességét szabályozhatjuk.



2. ábra. Az ismertetett berendezés koincidencia görbeserei: a) prompt-prompt koincidencia görbék; b) prompt koincidencia görbék mindkét detektor differenciálisan szűk energiasávot detektál (differenciális beállítás); c) prompt koincidencia görbék mindkét detektor integrálisan detektálja az egész spektrumot

A koincidencia kör felbontóképességének a kimérése általában úgy történik, hogy egyetlen detektor jeleit vezetjük a berendezés bemeneteire. Ilyenkor biztosan minden impulzushoz tartozik egy vele koincidenzában levő, vele teljesen azonos impulzus. A már említett jelformálásokon kívül a két impulzust egymáshoz képest mesterségesen különböző mértékben késleltetjük. Ha a késleltetés függvényében, különböző felbontóképességek, mint paraméterek mellett felvesszük a koincidencia számot, kapjuk az ún. prompt-prompt koincidencia görbe sereget (2a ábra). A feloldó idő  $\tau$  definíció szerint, a görbe félmagasságánál mért idő fele. A prompt-prompt elnevezés arra utal, hogy a vezérlő jel mindkét oldalon teljesen azonos. Tehát detek-

\* A szakirodalom ismertet egy módszert a probléma megoldására [2]. A koincidencia kör küszöbérzékenységét változtatják meg. Nagy jelekre érzéketlenebbé, kis jelekre érzékenyebbé teszik a berendezést.







A berendezés rajza a 3. ábrán látható. A jelformálást a két bemenő fokozatnak megfelelően  $T_2$ ,  $T_3$ , valamint  $T_5$  és  $T_6$  végzi. ( $T_1$  szerepére a dolgozat végén térünk ki.)  $T_2$  és  $T_5$  (long-tailed pair) az impulzusokat erősíti, és egyben amplitúdóban limitálja. Ezáltal a jelek induló szakasza meredekebbé válik,  $T_3$  és  $T_6$  diszkriminátorok már szabályos négyszögletes impulzusokat szolgáltatnak. A diszkriminátorok előfeszültsége ( $P_1$  és  $P_2$ ) szabja meg azt az amplitúdó szintet, aminél működésbe lép a koincidencia kör.

$D_1$  és  $D_2$  késleltető vonalak teszik lehetővé a koincidencia görbék felvételét,  $D_1$  0–0,5  $\mu$  sec-ot késleltet. A késleltetés nagysága folyamatosan változtatható.  $D_2$  késleltető vonalon 0,25 és 0,75 rögzített értékek állíthatók.  $D_2$  állandó késleltetés biztosítja azt, hogy a koincidencia görbe sereget teljes egészében felvehessük, azaz a koincidencia kör felső csatornáján ( $D_1$ ) haladó impulzusok ne csak készenek az alsó csatorna ( $D_2$ ) impulzusaihoz képest, hanem azokat meg is előzhessék.  $D_2$  késleltető vonalnak azért van két beállítható értéke, hogy a berendezést ne csak koincidencia, mérésekre, hanem impulzusalak diszkriminációra (P. S. D.) is felhasználhassuk.

A különböző mértékű késleltetés különböző mértékű csillapítást jelent, ami az impulzusok amplitúdójának megváltozását eredményezi. Ezt az amplitúdóváltozást a következő  $T_4$  és  $T_7$  fokozatok megszüntetik. Ezek az előző fokozathoz hasonló billenő körök. A második csőfél anódjairól vesszük le a koincidencia fokozat vezérléséhez szükséges négyszögletes, azonos amplitúdójú jeleket. A négyszög jelek hosszát  $D_3$  és  $D_4$  rövidre zárt késleltető vonalak szabják meg. A jelek hossza 0,2  $\mu$  sec, ami egyúttal a beállítható legrosszabb feloldó idő.

A koincidencia fokozat 6 BN 6-al van megoldva [4]. Az optimális működéséhez szükséges adatok a kapcsolási rajzról leolvashatók.

A 6 BN 6-anódkörében levő 100 k $\Omega$ -al és az anódköri szórt kapacitásokkal az impulzusok erősen meg vannak integrálva. Ezeket az impulzusokat tovább erősítjük  $T_9$  segítségével, majd  $T_{10}$  diszkriminátor segítségével amplitúdó szerint válogatjuk.  $T_{10}$  előfeszültségét szabályozó  $P_5$  potenciométer így egyben a koincidencia kör felbontóképességét szabályozza.

A kapcsolás további része tartalmaz még egy lassú koincidencia fokozatot, ami lehetővé teszi, hogy a berendezés lassú-gyors koincidencia mérésekre is alkalmas legyen. A lassú koincidencia fokozat lényegében diódás „és” kör. Ez úgy van méretezve, hogy ha a bemeneteire alacsony impedanciájú (< 1 k $\Omega$ ) pozitív impulzusforrással csatlakozunk (pl. differenciál diszkriminátorral), a berendezés jól működik, függetlenül attól, hogy hány bemenetet használunk fel vezérlésre.

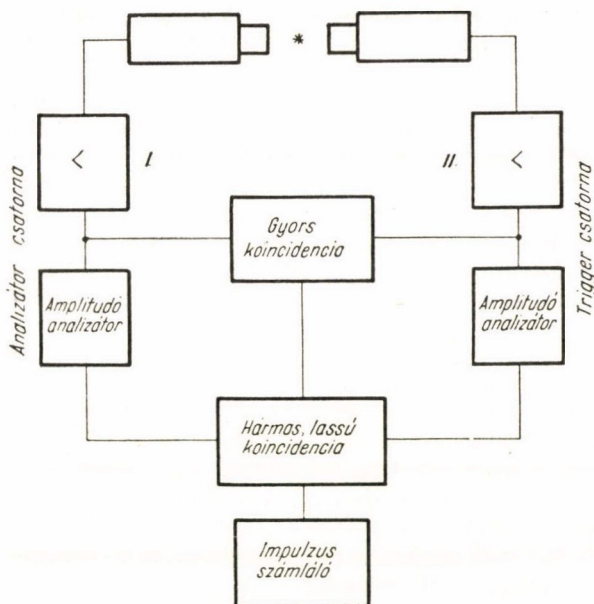
$T_{11}$  szerepe impulzusformálás, míg  $T_{12}$  alacsony impedanciájú kimenetet biztosít az egész berendezés számára.

### Lassú-gyors rendszer

A legtöbb koincidencia vizsgálatnál nem szoktunk azzal megelégedni, hogy létezik-e koincidencia vagy nem, hanem arra is kíváncsiak vagyunk, hogy milyen energiájú részecskék vannak egymással koincidenciában. Ennek a kívánságnak a kielégítése tette szükségessé a lassú-gyors koincidencia rendszer kifejlesztését. Ennek lényege az, hogy két koincidencia kört alkalmazunk a méréseknél, egy gyorsat és egy lassút. A gyors kör a részecske energiájától függetlenül megállapítja, hogy van-e



koincidencia vagy sem. A lassú kör még egy további energetikai kiválasztást is végez és megmondja, hogy milyen energiájú részecskék között van a koincidencia. A gyors koincidencia egység tehát minden olyan esetben, amikor feloldó idején belül két



4. ábra. Lassú-gyors koincidencia berendezés blokkdiagramja

impulzus érkezik, impulzust küld a lassú koincidencia körbe jelezve, hogy a koincidencia feltétel teljesült. Ugyanakkor az amplitúdó analízátorok is jeleket küldenek a lassú koincidencia körbe jelezve, hogy az amplitúdó feltételek is teljesültek.

Lassú-gyors koincidencia rendszernél a véletlen koincidencia számot kísérletileg úgy határozzuk meg, hogy a gyors koincidencia kör egyik bemenetén legalább akkora vagy nagyobb késleltetést alkalmazunk, mint amekkora a gyors kör feloldó ideje. (A gyakorlatban  $3-5\tau$  késleltetést szoktak beiktatni.) Az ilyen körülmenyek között leszámolt impulzusszám a véletlen koincideneciák száma. Másrésztől kiszámíthatjuk a véletlen koincidencia számot az  $N_p = 2\tau N_1 N_2$  képlet alapján, ahol

$\tau$  a gyors koincidencia kör felbontóképesége  $N_1$  ill.  $N_2$  pedig az I ill. II csatorna analízátorainak kimenetén megjelenő impulzusok száma. Ez a képlet mindaddig jól használható, amíg  $N_1$  és  $N_2$  nem közelíti meg  $1/\tau_i$  értékét, ahol  $\tau_i$  a lassú koincidencia kör feloldó ideje. Ez a feltétel a gyakorlatban többnyire teljesül.

#### A koincidencia kör jelleggörbéi és optimális mérési paramétereinek meghatározása

Mielőtt a koincidencia kör jelleggörbéit ismertetnénk, meg kell említenünk két alapvető koincidencia mérési módszert. Ezeken keresztül láthatjuk meg, hogy milyen szempont alapján kell beállítani a koincidencia berendezést optimális körülmények közé.

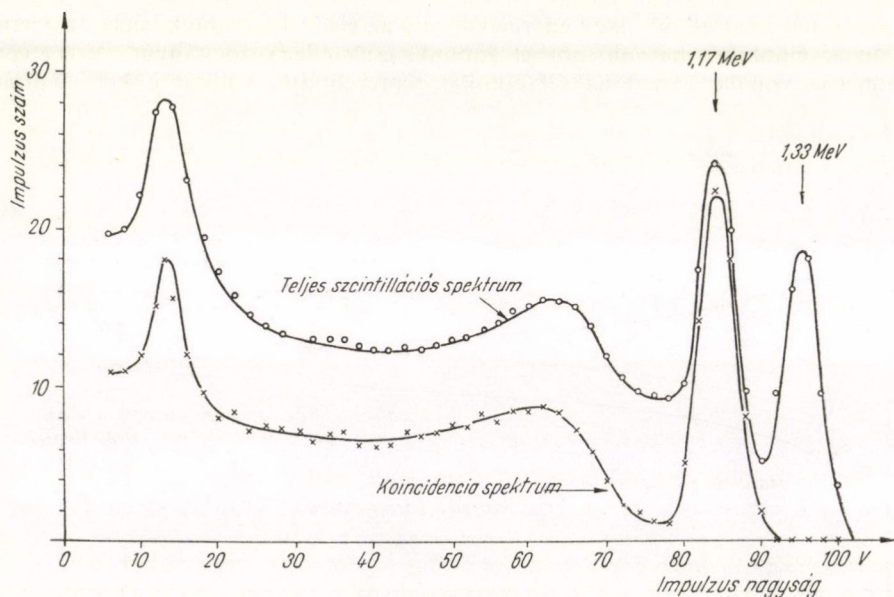
A koincidencia vizsgálatoknál legáltalánosabb kérdés, hogy egyáltalán létezik-e koincidencia a vizsgált magfolyamatnál vagy sem. Ezt gyakorlatilag úgy kell eldönteni, hogy mind a két analízort integrális működésbe állítjuk be, közel nulla diszkriminációs szint mellett és így nézzük meg, hogy létezik-e valódi hármas koincidencia. Más szóval mind a két analízator átengedi a teljes vizsgálandó spektrumot, és ily módon figyelmen kívül hagyjuk, hogy milyen energiák között van koincidencia kapcsolat.



Közelebbi felvilágosítást kapunk a magfolyamatról, ha azt vizsgáljuk meg, hogy milyen energiájú vonalak között van koincidencia. Ilyenkor a mérés úgy történik, hogy a II amplitúdó analízátorral csak egy meghatározott energiát detektálunk (differenciális beállítás) míg a másik, I analízátor végighaladva a spektrumon meghatározza az előbbivel koincideniciában levő energiát. Példával élve: két szcintillációs gamma detektorral a  $\text{Co}^{60}$  1,17 és 1,33 MeV energiájú fotonjai között úgy mutatjuk ki a koincidencia kapcsolatot, hogy a II amplitúdó analízátor (nevezik trigger csatornának is) csak az 1,33 MeV-es vonal fotocúcsát detektálja, míg az I amplitúdó analízátor (analízátor csatorna) végigmegy a teljes spektrumon, és a hármas koincidencia így leszámol minden, 1,33 MeV-el koincideniciában levő sugárzást. Az így felvett  $\text{Co}^{60}$  koincidenencia spektrum csak az 1,17 MeV-nek megfelelő szcintillációs gammaspektrumot tartalmazza (5. ábra).

Méréseinknél felvetődik a kérdés, mekkora feloldó idővel működtessük a berendezést, és a kapcsoláson szereplő késleltető vonalakat milyen értékre állítsuk. A késleltetővonal optimális beállítását leolvashatjuk a koincidenencia görbe seregről (2. ábra). A kérdéses mérési módszernél (integrális mindkét analízátor (2c ábra), vagy differenciálisan állnak egy-egy energia értéken (2b ábra)) felvesszük a koincidenencia görbe sereget, és a késleltető vonallal beállunk a görbesereg közepére, mivel itt a számlálási hatások maximális. Mint hamarosan látni fogjuk, ez a késleltetés nem egy meghatározott érték, hanem ezt a mérés természete szerint mindig külön kell meghatározni, hacsak nem elégszünk meg igen nagy feloldó idővel.

Ami pedig a feloldó időt illeti, a véletlen koincidenencia szám minimális értéken tartása azt diktálja, hogy a lehető legjobb felbontóképességgel dolgozzunk. A feloldó időt, mint tudjuk, egyrészt a beérkező impulzusok között mutatózó idő-

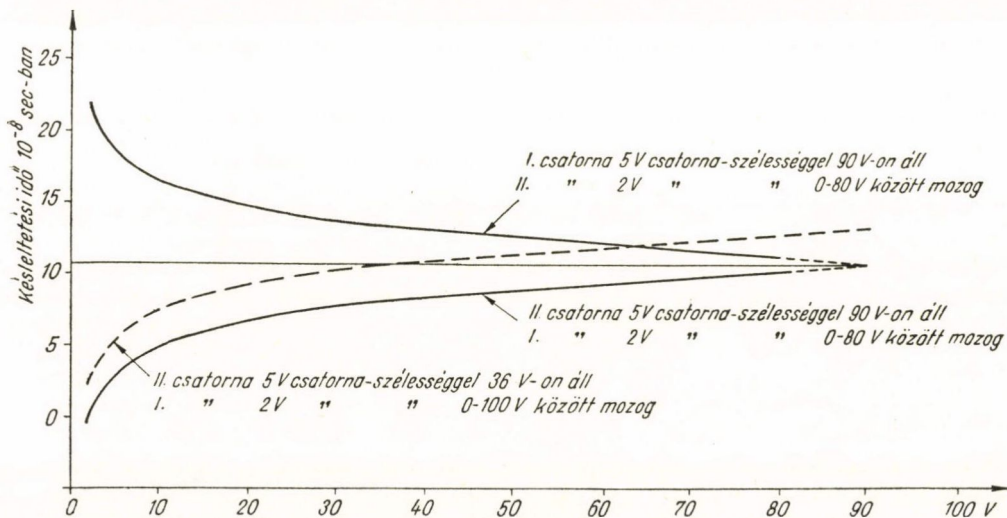


5. ábra. A  $\text{Co}^{60}$  szcintillációs gamma spektruma és az 1,33 MeV-es energiával koincideniciában levő spektrum

bizonytalanság, másrészt a detektor impulzusainak véges emelkedése és különböző amplitúdója korlátozza. Az első nehézségen legfeljebb gyorsabb detektor kiválasztásával segíthetünk. A második probléma megoldási lehetőségeivel már foglalkoztunk (1. ábra). Mint tudjuk, teljesen kiküszöbölni ezt a jelenséget nehéz lenne, így figyelembe kell venni a hatását. Hatását meglátjuk, ha összehasonlítjuk azt a koincidenencia görbe sereget, amit az analízátorok differenciális beállítása mellett vettünk fel azzal, amit integrális beállítás mellett kapunk (2b és 2c ábra). Az előbbi esetben sokkal jobb feloldó idő érhető el. Ilyenkor ugyanis egy bizonyos nagyságú impulzus van koincidenenciában egy másik, szintén meghatározott nagyságú impulzussal. Lehet, hogy ezek az impulzusok nem egyszerre indítják a koincidenencia kört, hanem bizonyos időkésséssel, de ez nem jelent időszórást, hanem csak időeltolódást, amit a késleltetés megfelelő beállításával kompenzálhatunk. Tehát a koincidenencia görbe nem szélesedik ki, hanem az egyidejű indításhoz képest eltolódik.

Más a helyzet az integrális beállításnál, ahol néha azonos nagyságú, néha pedig különböző nagyságú jelek között van koincidenencia. Ez már a koincidenencia kör indításánál időszórást, a koincidenencia görbénél kiszélesedést eredményez.

Világos képet kapunk a kérdésről, ha az egyik analízátorral nagy energiaértékre állunk be (90 V-os diszkriminációs feszültség), míg a másik analízátorral differenciális beállításban végigmegyünk az energia skálán 0–80 V-ig és a mérési pontoknál felvesszünk legalább egy koincidenencia görbét. A 6. ábrán az egyes diszkriminációs feszültségekhez tartozó koincidenencia görbe középvonalának késleltetési értéke van feltüntetve. A kapott diagram teszi lehetővé, hogy a méréseknél leolvassuk a késleltető vonalak optimális értékeit. A koincidenencia görbék középvonala nagy energiáknál gyakorlatilag mindig azonos késleltetéshez esik, de alacsonyabb energiák felé haladva rohamosan eltolódik. Ha a két analízátor szerepét felcseréljük, és a másikkal állunk nagy energiákra míg az elsővel haladunk végig az energiaskálán az előbbihez hasonló görbét kapunk, csak ellenkező irányút. A két görbe szimmetria vonala azokat az állapotokat reprezentálja, amikor a két analízátor



6. ábra. Koincidenencia görbék középvonalának eltolódása az impulzus nagyság függvényében



azonos feszültségértéken áll. A két görbe segítségével tetszőleges diszkriminátor állásokhoz tartozó koincidencia görbe középvonal helyzete meghatározható a görbe párhuzamos eltolásával. Példaként láthatjuk az ábrán azt az esetet (szaggatott vonal) amikor a II csatorna 36 V-os diszkriminációs feszültségen áll és az I csatorna feszültségét változtatjuk 0 és 100 V között. Az eltolás mértékét az szabja meg, hogy a görbének ott kell metszenie a szimmetriatengelyt, ahol a két csatorna előfeszültsége azonos.

A koincidencia berendezés annál jobb, mennél kevésbé ágazik szét a két görbe és emellett a feloldó idő is kicsi. Az elmondott effektus természetesen csak akkor jön számításba, amikor a detektor jelének emelkedési idejénél lényegesen rövidebb koincidencia feloldó időre törekszünk. Például NaJ(Tl)-al működő szcintillációs detektoroknál  $10^{-7}$  sec alatt.

A görbéből leolvashatók a következők. Ha úgy akarunk koincidencia méréseket végezni, hogy mindkét detektor jeleit integrálisan számolja a lassú-gyors rendszer, akkor korlátozva van az alkalmazható legjobb feloldó idő, ill. a koincidencia spektrum bizonyos energia alatti részét levágjuk. Pl. ha az adott görbével dolgozunk  $1,5 \cdot 10^{-7}$  sec feloldási idő esetén a spektrum kb. 15 V alatti részét levágjuk (15 V-nál távolodik el a két görbe kb.  $1,5 \cdot 10^{-7}$  sec egymástól).

Sokkal kedvezőbb az eset, ha mind a két csatornával differenciálisan dolgozunk, mivel ekkor a valódi koincidenenciák létrejöttéhez szükséges késleltetést mindig utána állíthatjuk. Így egy nagyságrenddel rövidebb feloldó idő könnyen elérhető.

Közbenső állapotot foglal el az az eset, amikor az egyik csatorna differenciálisan áll egy helyen, míg a másik integrálisan dolgozik. Ez az eset valósul meg akkor, amikor az egyik analizátor szerepét egy sokcsatornás analizátor tölti be, míg a másik analizátor egy meghatározott energiát detektál. Ebben az esetben is egy kettes faktor javulás következik be az elérhető feloldási időben a tiszta integrális beállítás-hoz képest. Előbbi példánál maradva, ha a 15 V-os diszkriminációs feszültség alatti rész elvesztésével számolunk,  $7,5 \cdot 10^{-8}$  sec feloldási idő alkalmazható.

Az ismertetett jelenség a koincidencia spektrumon torzulást eredményezhet természetesen nemcsak az alacsony energiájú tartományban, hanem a nagy energiájú részben is, attól függően, hogy a koincidencia körben levő késleltető vonallal hova álltunk be.

### A koincidencia kör alkalmazási területei és tulajdonságai

A következőkben sorra vesszünk néhány feladatot, melyeket a koincidencia körrel meg lehet valósítani, és ismertetjük a velük szerzett tapasztalatokat.

#### Normál koincidencia vizsgálatok

Normál koincidencia vizsgálatokat szoktak a gyakorlatban legtöbbször alkalmazni. A berendezés blokk diagramja látható a 4. ábrán. Működési mechanizmusát már ismertettük. Inkább egy-két mérés technikai megoldásra kívánunk itt rámutatni.

Koincidencia vizsgálatokat különösen ismeretlen magfolyamatoknál úgy célszerű kezdeni, hogy a triggercsatornát alacsony diszkriminációs feszültség mellett integrális üzemmódra állítjuk, úgy, hogy minden létező sugárzást detektálhassunk. Ezután az analizátor csatornával végighaladva a teljes spektrum tartományon felvesszük a koincidencia spektrumot. Ez a koincidencia spektrum tartalmazza az



összes egymással koincidenzában levő vonalakat. — Viszont nem lehet belőle meghatározni, hogy mely vonalak vannak egymással koincidenzában. Hogy ezt eldöntsük a triggercsatornával most már differenciális üzemmóddal rendre be kell állani az előzőekben kapott koincidenzá spektrum egyes csúcsaira. — Majd ilyen körülmények között az analízátor csatorna segítségével újból fel kell venni az egyes csúcsokhoz tartozó koincidenzá spektrumokat. Ezek a koincidenzá spektrumok már egyértelműen azt is megmutatják, hogy egy meghatározott energiájú vonal (triggercsatorna ezen áll) milyen más vonallal, esetleg vonalakkal (koincidenzá spektrum) van koincidenzában.

Az analízátor csatornában a csatorna-szélességét mind a két mérésnél célszerű alacsony értéken (0,5–2 V) tartani, hogy megőrizhessük a berendezés jó spektrális felbontóképességét. A triggercsatornában a második méréssorozatnál olyan nagyra célszerű választani a csatorna szélességét a nagy impulzusszám érdekében, hogy az a vonal, amire álltunk, teljesen beleérjen. Csupán arra kell vigyázni, hogy más vonal ne érjen bele a csatornába, ami megamisíthatja a mérési eredményeket. Az említett módszer, bár általánosan elterjedt, egy hibával rendelkezik. Nehéz a segítségével kis intenzitású vonalakat kimutatni, ill. nagy intenzitású vonalak között ilyet felfedezni. Ennek a problémának a megoldására dolgozták ki az alábbi módszert.

A triggercsatorna az előző esethez hasonlóan integrálisan működik, míg az analízátorcsatorna a teljes spektrumon halad végig differenciálisan, csak hogy ezt a koincidenzá spektrum felvételt több ízben megismételjük, miközben a triggercsatornával a nagy energiáktól az alacsonyak felé haladunk apró lépésekben. Így egy koincidenzá görbesereget kapunk. A görbeseregben egymásután jelennek meg újabb és újabb vonalak, amint a triggercsatorna eléri a velük koincidenzában levő energiákat. A módszer szép alkalmazására látunk példát az irodalomban [5]. Sajnos ennek a vizsgálatnak nagy hátránya a hosszadalmas volta, ezért igen ritkán használják.

A véletlen koincidenzá számot normál koincidenzá vizsgálatoknál megfelelő késleltetés beiktatásával megmérhetjük, vagy kiszámíthatjuk, úgy amint ezt már korábban említettük.

A késleltető vonal, valamint a feloldóképesség optimális beállításáról szintén részletesen beszámoltunk az előző részekben.

### Összeg koincidenzá vizsgálatok

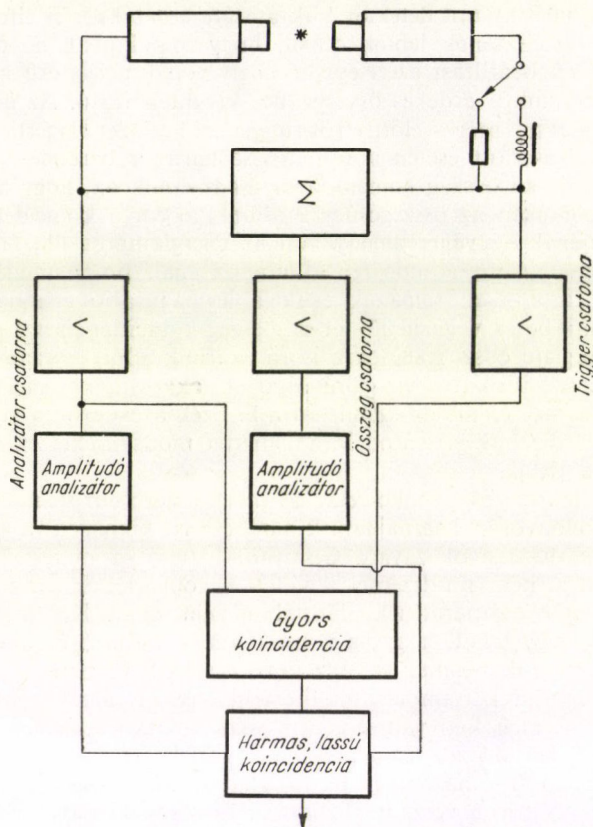
1958 óta bevonult a szcintillációs gamma spektroszkópiába az összeg koincidenzá módszer. Ennek legnagyobb előnye, hogy a koincidenzá spektrumon csak a teljes energiát reprezentáló („foto”) csúcsok jelennek meg — tehát a mindig kellemetlen háttérként jelentkező Compton tartomány eltűnik. Továbbá az energia feloldóképesség a módszer alkalmazásával lényegesen megjavul. A módszert itt nem kívánjuk ismertetni, mivel ez az irodalomban megtalálható [6] inkább az alkalmazásával kapcsolatban szerzett néhány tapasztalatot szeretnénk közreadni, annál is inkább, mert alkalmazásától bizonyos hátrányai miatt idegenkednek.

Az összeg koincidenzá módszert Hoogenboom eredetileg lassú koincidenzá ( $\sim 10^{-6}$  sec) kapcsolásban ismertette. Az itt bemutatott kapcsolat a lassú-gyors elvet használja fel, tehát jobb időfelbontást biztosít ( $\sim 10^{-8}$  sec). Viszont meg kell jegyezni, hogy ez a kapcsolat kihat az összeg koincidenzá spektrumra. Itt ugyanis nem kapunk ún. összeg csúcsot (sum peak). Ennek az az oka, hogy a koincidenzá



kör csak akkor lép működésbe, ha mind a két detektorból kap jelet. Ilyen esetben pedig nem abszorbeálódhat mind a két gamma foton az analizátor detektorban. Ez a jelenség nem jelent hátrányt, sőt lehetővé teszi, hogy az összeg csúcsához esetleg egészen közel eső gammakvantumokat is kimutassunk.

Az összeg koincidencia mérések legszigorúbb feltétele, hogy mind a két detektor azonos nagyságú jeleket adjon azonos energiák abszorpciója esetén. Ennek



7. ábra. Összeg koincidencia módszer blokkdiagramja. Az elrendezés a jobb időfelbontás érdekében a lassú-gyors elvet alkalmazza

teljesítéséhez stabil elektronsokszorozót és nagy stabilitású magasfeszültségű egysegeket kell alkalmazni. A pontosan azonos jel nagyság beállításának legjobban bevált módja, hogy az összegező csatornában levő diszkriminátornak egy előre kiválasztott diszkriminációs szintjére állítjuk be a vizsgált spektrumnak egy intenzív vonalát. A beállítás az elektronsokszorozóra kapcsolt feszültség megfelelő beállításával történik. Arról, hogy a csúcs pontosan a kívánt csatornába esik-e, úgy győződhetünk meg, hogy a diszkriminátor előfeszültségét néhány volttal (2–3 V) alacsonyabb, majd magasabb értékre állítjuk, mint a kiválasztott diszkriminációs



feszültség. Helyes nagy feszültség esetén mindkét esetben ugyanazt az impulzusszámot kapjuk, mivel ilyenkor a csúcs két szemközti oldalának azonos nagyságát ellenőrizzük. A csúcs igen kis eltolódása nagy impulzusszám-különbséget eredményez, ezért általában ratemeterrel történő impulzusszám mérés is elegendő. — A spektrum beállítását külön-külön kell elvégezni mind a két csatornánál. A vizsgálaton kívüli csatornáról a nagyfeszültséget lekapcsolni nem célszerű, mert ez az elektron-sokszorozó erősítési tényezőjének kismértékű megváltozását eredményezi. Célszerűbb megoldás a nem kívánt detektor kiiktatására a detektorfej elfordítása a sugárforrástól, vagy kimenetének leblokkolása, hogy impulzusok ne érkezhessenek az összegező körbe. A beállítást azért egy intenzív vonalra célszerű megcsinálni, mert rendszerint a számunkra érdekes összegcsúcs kis intenzitású. Az összegcsúcs helyét kísérletileg megkeresni mérés előtt ettől függetlenül célszerű, mert esetleges túlterhelődés nagy impulzusszám esetén nonlineárisá teheti a berendezést.

Komoly hibája az összeg koincidencia módszernek az, hogy ha az összeg csatornában nem pontosan az összegcsúcsra állunk, akkor a koincidencia spektrumon a csúcsok eltolódnak — végeredményében az energiamérés illuzórikussá válik [7]. További problémát jelent a módszer alkalmazásánál, hogy minden további megfontolás nélkül a bomlási sémának csak a legmagasabb energiáját reprezentáló csúcsára állhatunk be és végezhetjük el az összeg koincidencia vizsgálatokat. Ha az alacsonyabb energiájú összegcsúcsokra is rá akarunk állni — azaz a kisebb energia összeget kiadó kaszkádokat is vizsgálni akarjuk, akkor a koincidencia spektrumon több hamis csúcs megjelenésére számíthatunk. Ezek a csúcsok a nagyobb energiájú kaszkádoktól származnak. Az irodalom ismertet módszereket ezen hamis csúcsok meghatározására [7,8].

Az említett hátrányok szögkorrelációs méréseknél nem számottevőek. Így ezen a területen igen előnyösen használhatjuk a módszert, kihasználva azt a jó tulajdonságát, hogy más sugárzások zavaró Compton-háttérét a mérésnél távoltarthatjuk.

Összeg koincidencia módszernél a véletlen koincidencia számot meghatározni számítással  $N_1$  és  $N_2$  ismeretének hiányában nem lehet. Késleltetés beiktatásával megmérni is csak úgy lehet, hogy ha a blokksémán látható módon egy külön késleltető vonalat iktatunk be még az összegező egység bemenete előtt. Gondolni kell ugyanis arra, hogy ha két impulzust elkésleltetünk egymástól, akkor azok amplitúdó összegének is meg kell változnia az összegező kör kimenetén.

Az optimális feloldó idő és a megfelelő késleltetés meghatározását a normál koincidencia módszerhez hasonlóan határozhatjuk meg. Csak itt a triggercsatorna szerepét az összegcsatorna veszi át. Tehát az összegcsatornával ráállunk az összeg csúcsnak megfelelő feszültségértékre, az analízátor csatornával végighaladunk az analizálandó spektrum tartományon, és néhány helyen felvesszünk egy-egy koincidencia görbét. Majd ábrázoljuk a koincidencia görbék középvonalának helyét a diszkriminációs feszültség függvényében (mint a 7. ábránál).

### Koincidencia körök alkalmazása jelalak diszkriminátornál

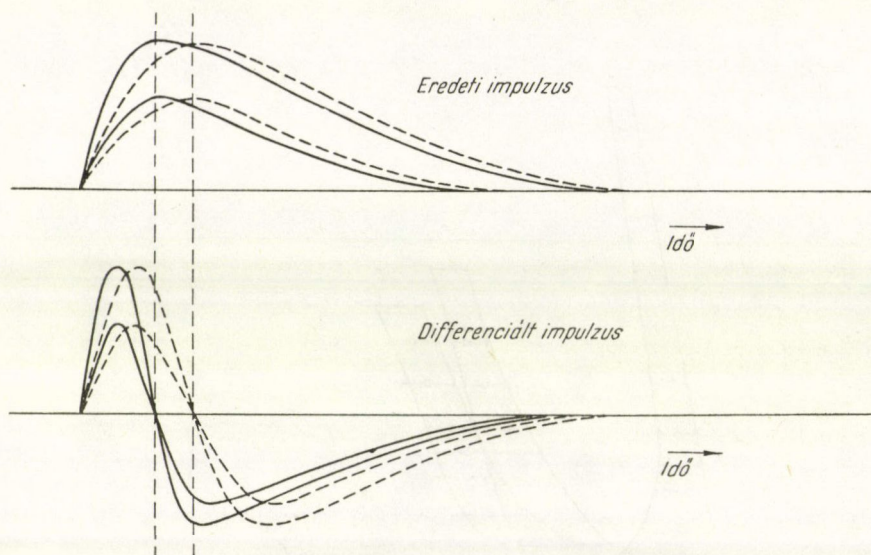
#### Töltött részecskék identifikálása

Egyes szcintillációs foszforoknak régóta ismeretes az a tulajdonsága, hogy fényemissziójának lecsengési ideje függ a detektált részecskék természetétől; CsJ(Tl) szcintillátor nehéz töltött részecskék, pl. alfa-részek esetén viszonylag rövid, könnyű



részecskénél, pl. elektronnál, hosszabb lecsengési idővel emittálja a fényt. Ez az elektronsokszorozó anódkörében kialakuló impulzusok emelkedési idejében eredményez majd különbséget. Alfa-részek esetén rövid, elektronok esetén hosszú lesz az impulzus emelkedési ideje.

Az impulzus emelkedési idejét vagy legalábbis az azzal arányos időt a következőképpen mérhetjük meg [9]. Az impulzust RC taggal megdifferenciáljuk, és

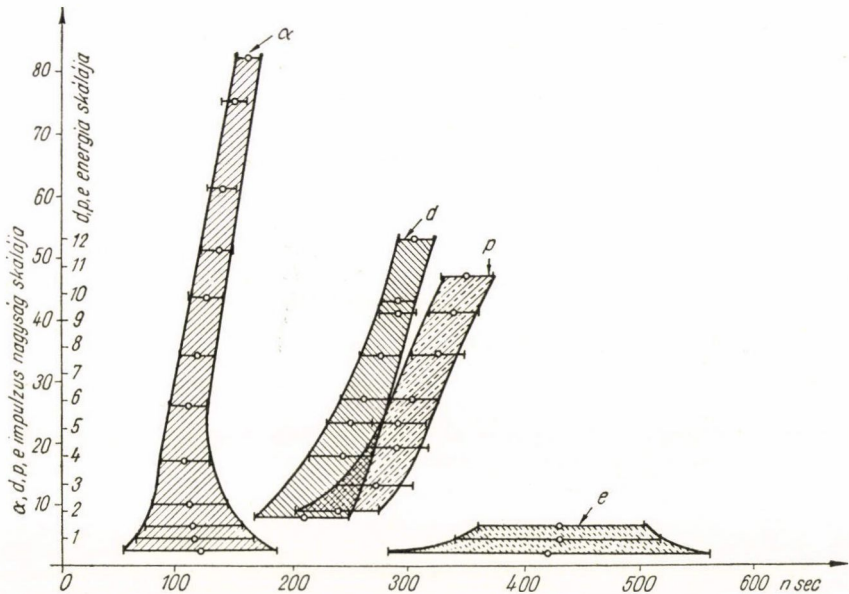


8. ábra. Detektorból származó impulzusok és azok differenciáltja. — A megdifferenciált impulzus az idő-tengelyt az eredeti impulzus emelkedési idejétől függően előbb vagy később metszi. — Ugyanakkor a metszéspont helye független az impulzus amplitudójától

mérjük az impulzus indulása és az időtengely metszéspontja közt eltelt időt. A metszéspont meredekebb jelnél hamarabb — kevésbé meredek jelnél későbben következik be. Koincidenca körrel ez az időmérés könnyen megvalósítható. Az impulzus eleje indítja a koincidenca kör egyik csatornáját, míg a differenciált impulzus null átmenete (fázisfordítás után a pozitív hullám kezdete) a másik csatornát. A végeredmény az lesz, hogy a különböző részecskékhez egymástól különálló koincidenca görbék tartoznak majd. Az egyik koincidenca görbe csak alfa-részekből származó impulzusokat, a másik csak elektronokból származó impulzusokat tartalmaz majd. A koincidenca kör kapcsolási rajzán látható  $T_1$  fokozat végzi a differenciálást és a fázisfordítást. Az impulzus eleje és a null átmenet között, hogy koincidenca létrejött, természetesen  $D_2$  késleltető vonalból a nagyobb késleltetést kell beiktatni.

Impulzusalak diszkriminációnál (PSD) szerencsés körülmény folytán mindig aránylag jó idő feloldással lehet működtetni a koincidenca kört. Itt ugyanis nagy impulzus mindig naggyal, kicsi kicsivel van koincidenzában. Végeredményében a koincidenca körben a diszkriminátorok előfeszültségét be lehet úgy állítani, hogy

a koincidenca görbék középvonalának a helyzete független legyen a diszkriminációs feszültségtől. (Ez egészen pontosan nem teljesül, mert az eredeti jel nincsen olyan meredek mint a differenciált, de az eltolódás elhanyagolható az elérhető idő feloldáshoz képest.) A feloldó idő nagyságát az impulzusalak diszkriminátornál az impulzus alakjának bizonytalansága határozza meg. Az impulzus alakjának pontossága viszont a szcintillátor által emittált fotonok számától függ. — Ezért nagy energiáknál jobb, alacsony energiákon rosszabb feloldó idővel dolgozhatunk.



9. ábra. Különböző töltött részecskék elválasztása impulzusalak diszkriminációval, az energia függvényében

A 9. ábrán láthatjuk, hogy CsJ(Tl) kristály alkalmazásával különböző energiáknál (impulzus nagyságnál), hogyan lehet elválasztani a módszerrel egymástól alfákat, deutériumokat, protonokat és elektronokat. A különböző részecskékhez tartozó sávok szélessége egy adott impulzus nagyságnál azt mutatja, hogy mekkora minimális időfeloldással ( $\tau$ ) lehet működtetni a koincidenca kört.

#### Egymásra ülő (pile-up) impulzusok eliminálása

Magspektroszkópiai méréseknél előfordul, hogy nagy energiájú, de kis intenzitású vonalak mérése lehetetlenné válik, mert kisebb energiájú, de intenzív háttér impulzusai egymásra ülnek és olyan nagy impulzust adnak, mintha nagy energiájú részecskét detektált volna a berendezés. Az ilyen impulzusokat nagy mértékben kiszűrhetjük fentebb ismertett jelalak diszkriminációval [10]. Két impulzus összegének eredője általában egy torz — mindenesetre az eredetinél nagyobb emelkedési idejű impulzus. Ha tehát koincidenca körrel a torzítatlan impulzu-



sokat választjuk ki, akkor a berendezés kiszűri az egymásra ülőket. Figyelembe kell azonban venni, hogy a véletlen koincidenciaszámhoz hasonlóan itt is lehetnek olyan esetek, amikor a koincidencia kör feloldó idején belül érkezik két részecske a detektorba és eredményez egy hamis impulzus nagyságot az amplitúdó spektrumban. Ezeket az impulzusokat késleltetés beiktatásával a véletlen koincidenciaszám méréséhez hasonló módon megszámlálhatjuk. Pusztán arra kell vigyázni a késleltetés beiktatásánál, hogy két impulzus összege az eredetnél csak nagyobb emelkedésű idejű impulzust eredményezhet, rövidebbet semmi esetre sem. Esetünkben tehát  $D_1$  értékét növelni kell a véletlen koincidencia meghatározásánál.

## IRODALOM

- [1] *W. Meiling, J. Schintlmeister and F. Sary*, Nucl. Instr. and Meth., 21, 275, 1963.
- [2] *J. E. Draper and A. A. Fleischer*, Rev. Sci. Instr., 31, No. 1. 49, 1960.
- [3] *Advances in Electronics and Electron Physics*, 8, 255, 1956.
- [4] *J. Fischer and J. Marschall*, Rev. Sci. Instr., 23, 417, 1952.
- [5] *E. Boschitz*, Zeitschrift für Physik, 154, 90, 1959.
- [6] *A. M. Hoogenboom*, Nucl. Instr. and Meth., 3, 57, 1958.
- [7] *Gy. Máthé, D. Berényi and T. Scharbert*, Nucl. Instr. and Meth., 14, 209, 1961.
- [8] *S. O. Schriber and B. G. Hogg*, Nucl. Instr. and Meth., 26, 141, 1964.
- [9] *Gy. Máthé and B. Schlenk*, Nucl. Instr. and Meth., 27, 10, 1964.
- [10] *Gy. Máthé*, Nucl. Instr. and Meth., 23, 261, 1963.





# A $H_2$ MOLEKULA $1sns^1S$ ÁLLAPOTAINAK MOLEKULAPÁLYA-MÓDSZERES SZÁMÍTÁSAI II.\*

BERENCZ FERENC

József Attila Tudományegyetem Elméleti Fizikai Intézete, Szeged

A  $H_2$  molekula  $1s3s^1S$  állapotának elektronenergiáját határoztuk meg molekulapályamódszeres számításokkal. Megállapítottuk továbbá, hogy a  $H_2$  molekula  $1sns^1S$  ( $n=1, 2, 3$ ) állapotainak MO-módszerrel számított energiaértékei a kísérleti értéktől maximálisan 4,5%-os eltérést mutatnak. Az MO-módszer tehát viszonylag alacsony hibahatárral egyaránt alkalmas az alapállapot és a gerjesztett állapotok elméleti vizsgálatára.

## Bevezetés

Ismeretes, hogy a Schrödinger-egyenlet egzakt megoldása már atomok esetében is nagy nehézségekkel jár, amely tény molekuláknál csak fokozódik. Ezért molekulaproblémák megoldásánál rendszerint közelítő eljárásokra vagyunk utalva. Az egyik igen gyakran eredményesen használt közelítő eljárás az MO-(Molecular Orbital) módszer, amelynek *Hund* [1], *Mulliken* [2], *Hückel* [3] és *Lennard—Jones* [4] kezdeményezése vetette meg az alapját. Az MO-módszernél abból a feltevésből indulunk ki, hogy a molekulában az elektronok nem a molekulát felépítő egyes atomokhoz tartoznak, hanem a molekulához, mint egészhez. Ennek megfelelően az egyes elektronok molekulapályái többcentrumosak lesznek, ellentétben az egycentrumos atomi pályákkal. Az egyes elektronok többcentrumos molekulapályáit az egyes elektronok egycentrumos atomi pályáinak lineáris kombinációjával (LCAO-módszer) képezzük. A molekula állapotát leíró MO-t pedig az egyes elektronok MO-inak szorzataként adjuk meg. Meg kell azonban jegyezni, hogy két atomi pálya között csak akkor jön létre effektív lineáris kombináció, ha az egyes atomi pályákkal számított energiaértékek összemérhető nagyságúak, töltésfelhők maximálisan fedik egymást és a molekulatengelyre vonatkozólag ugyanazzal a szimmetriával rendelkeznek. A  $H_2$  molekula alapállapotára vonatkozólag elsőnek *Weinbaum* [5] végzett LCAO-MO-módszeres számításokat. Egy előző dolgozatban [6] megadtuk a  $H_2$  molekula  $1s2s^1S$  gerjesztett állapotára vonatkozó LCAO-MO-módszeres számításainkat, a jelen dolgozatban pedig kiterjesztjük ezeket az  $1s3s^1S$  állapotra is, majd egybevetjük *Weinbaum* és az általunk elért eredményeket a kísérleti eredményekkel.

## A számítási eljárás

Az  $ns$  állapotok hidrogénsajátfüggvényeit a következő összefüggés szolgáltatja:

$$ns(r) = \frac{1}{n^{3/2}\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{r}{n}\right) R_n(r), \quad (1)$$

\* Érkezett 1964. dec. 5.

ahol

$$R_n(r) = 1 - \frac{n-1}{1!2!} \left( \frac{2r}{n} \right) + \frac{(n-1)(n-2)}{2!3!} \left( \frac{2r}{n} \right)^2 - \dots \quad (2)$$

A  $H_2$  molekula  $1s3s^1S$  állapotát leíró molekulapályát a bevezetésben elmondottak szerint úgy alkotjuk meg, hogy az alapállapotban levő  $1$ -es elektron molekulapályáját szorozzuk a gerjesztett állapotban levő  $2$ -es elektron molekulapályájával. Az alapállapotban levő  $1$ -es elektron és a gerjesztett állapotban levő  $2$ -es elektron LCAO-MO-ja (1) és (2) alapján a következő alakú

$$1s(r_{a1}) + 1s(r_{b1}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} [\exp(-r_{a1}) + \exp(-r_{b1})], \quad (3)$$

$$3s(r_{a2}) + 3s(r_{b2}) = \frac{1}{3\sqrt{3}\pi} \left\{ \left[ \exp\left(-\frac{r_{a2}}{3}\right) \right] \left( 1 - \frac{2}{3} r_{a2} + \frac{2}{27} r_{a2}^2 \right) + \left[ \exp\left(-\frac{r_{b2}}{3}\right) \right] \left( 1 - \frac{2}{3} r_{b2} + \frac{2}{27} r_{b2}^2 \right) \right\}. \quad (4)$$

Tehát a  $H_2$  molekula  $1s3s^1S$  állapotát leíró MO-t (3) és (4) figyelembevételével az alábbi formulával adhatjuk meg:

$$\begin{aligned} \psi_3 = & \frac{1}{3\sqrt{3}\pi} [\exp(-r_{a1}) + \exp(-r_{b1})] \times \\ & \times \left\{ \left[ \exp\left(-\frac{r_{a2}}{3}\right) \right] \left( 1 - \frac{2}{3} r_{a2} + \frac{2}{27} r_{a2}^2 \right) + \right. \\ & \left. + \left[ \exp\left(-\frac{r_{b2}}{3}\right) \right] \left( 1 - \frac{2}{3} r_{b2} + \frac{2}{27} r_{b2}^2 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Az elektronenergiát az

$$E_3 = \frac{\int \psi_3 H \psi_3 d\tau}{\int \psi_3^2 d\tau} \quad (6)$$

összefüggésből határozhatjuk meg, ahol

$$H = H_a + H_b - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} \quad (7)$$

és

$$H_a = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{r_{a1}} \quad (8)$$

$$H_b = -\frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{1}{r_{b2}}. \quad (9)$$



## A számítási eredmények

Weinbaum [5] a H<sub>2</sub> molekula (1S)<sup>2</sup> 1S alapállapotára vonatkozólag végzett LCAO-MO-s számításokat és a

$$\psi_1 = [1s(r_{a1}) + 1s(r_{b1})][1s(r_{a2}) + 1s(r_{b2})] \quad (10)$$

molekulapályával 1,12755 a *u*-hez jutott az elektronenergiára vonatkozólag. Szerző egy korábbi dolgozatában [6] az 1s2s<sup>1</sup> S állapot elektronenergiáját határozta meg a

$$\psi_2 = [1s(r_{a1}) + 1s(r_{b1})][2s(r_{a2}) + 2s(r_{b2})] \quad (11)$$

LCAO-MO-val és számításai 0,68086 a *u* elektronenergiához vezettek. Jelen dolgozatban pedig az 1s3s<sup>1</sup> S állapotra vonatkozólag végeztünk számításokat a

$$\psi_3 = [1s(r_{a1}) + 1s(r_{b1})][3s(r_{a2}) + 3s(r_{b2})] \quad (12)$$

LCAO-MO-val, amelyek 0,63400 a *u*-t szolgáltatnak az elektronenergiára vonatkozólag.

Hasonlítsuk össze az egyes számítások eredményeit a megfelelő kísérleti adatokkal, amelyek rendre a következők:

(1s) <sup>2</sup> 1S	1,17442 a u
1s2s <sup>1</sup> S	0,71188 a u
1s3s <sup>1</sup> S	0,65975 a u [7].

Az egyes állapotok esetében a kísérleti és számított elektronenergia-értékek közötti különbségek a következők:

(1s) <sup>2</sup> 1S	0,04687 a u (4,00%)
1s2s <sup>1</sup> S	0,03102 a u (4,36%)
1s3s <sup>1</sup> S	0,02575 a u (3,90%)

Az LCAO-MO-módszerrel számított értékek és a kísérleti értékek közötti különbségek 4,5%-os hibahatár alatt maradnak mindhárom esetben. Ebből a tényből azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a MO-módszernek a bevezetésben ismertett alakja egyaránt alkalmas az alapállapot és a gerjesztett állapotok elméleti vizsgálatára viszonylag jó eredménnyel.

Ezen a helyen is köszönetet mondok Boldizsár Annának a numerikus számolásoknál nyújtott segítségéért.

## Függelék

Az elektronenergia kiszámításánál több olyan kétcentrumos integrált kellett meghatározni, amelyek ez ideig nem szerepeltek az irodalomban. Jelöljük ezeket a következő módon:

$$\begin{aligned} I(\alpha, \beta, \gamma, \delta, s, t, u, v) = \\ = \frac{1}{\pi^2} \iint \exp(-\alpha r_{a1} - \beta r_{b1}) \exp(-\gamma r_{a2} - \delta r_{b2}) \times \\ \times r_{a1}^s r_{b1}^t r_{a2}^u r_{b2}^v \cdot \frac{1}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2. \end{aligned}$$

Ezeknek az integráloknak kiszámításánál úgy jártunk el, hogy az integrandusban a derékszögű koordinátákról áttértünk elliptikus koordinátákra, valamint felhasználtuk  $1/r_{12}$ -nek Neumann-féle sorát. Integráljainkat *Kotani, Amemiya és Simose* [8], valamint *Miller, Gerhauser és Matsen* [9] által tabellázott következő segédmenységekkkel fejeztük ki:

$$A_n(\alpha) = \int_1^{\infty} e^{-\alpha\mu} \mu^n d\mu,$$

$$B_n(\beta) = \int_{-1}^{+1} e^{-\beta v} v^n dv,$$

$$G_{\tau}^v(l, \beta) = \int_{-1}^{+1} P_{\tau}^v(v_i) e^{-\beta v_i} v_i^l (1 - v_i^2)^{\frac{v}{2}} dv_i,$$

$$H_{\tau}^v(i, \alpha; k, \beta) = \int_1^{\infty} \int_1^{\infty} e^{-(\alpha\mu_1 + \beta\mu_2)} \mu_1^i \mu_2^k Q_{\tau}^v(\mu_+) P_{\tau}^v(\mu_-) \times \\ \times (\mu_1^2 - 1)^{\frac{v}{2}} (\mu_2^2 - 1)^{\frac{v}{2}} d\mu_1 d\mu_2.$$

A kiszámított új integrálok a következők:

$$I(2, 0, \frac{2}{3}, 0, 0, 0, 0, 0) = \frac{R^5}{8} [H_0^0(2, R; 2, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(0, \frac{1}{3}R) + C_1 - \\ - H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(2, \frac{1}{3}R) - C_2 - \\ - H_0^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(0, \frac{1}{3}R) - C_3 + \\ + H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(2, \frac{1}{3}R) + C_4].$$

$$I(2, 0, \frac{2}{3}, 0, 0, 0, 1, 0) = \frac{R^6}{16} [H_0^0(2, R; 3, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(0, \frac{1}{3}R) + C_5 + \\ + H_0^0(2, R; 2, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(1, \frac{1}{3}R) + C_6 - \\ - H_0^0(2, R; 1, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(2, \frac{1}{3}R) - C_7 - \\ - H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(3, \frac{1}{3}R) - C_8 - \\ - H_0^0(0, R; 3, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(0, \frac{1}{3}R) - C_9 - \\ - H_0^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(1, \frac{1}{3}R) - C_{10} + \\ + H_0^0(0, R; 1, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(2, \frac{1}{3}R) + C_{11} + \\ + H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(3, \frac{1}{3}R) + C_{12}].$$



$$\begin{aligned}
 I(2, 0, \frac{2}{3}, 0, 0, 0, 2, 0) = & \frac{R^7}{32} [H_0^0(2, R; 4, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(0, \frac{1}{3}R) + C_{13} + \\
 & + 2H_0^0(2, R; 3, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(1, \frac{1}{3}R) + 2C_{14} - \\
 & - 2H_0^0(2, R; 1, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(3, \frac{1}{3}R) - 2C_{15} - \\
 & - H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) G_0^0(0, R) G_0^0(4, \frac{1}{3}R) - C_{16} - \\
 & - H_0^0(0, R; 4, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(0, \frac{1}{3}R) - C_{17} - \\
 & - 2H_0^0(0, R; 3, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(1, \frac{1}{3}R) - 2C_{18} + \\
 & + 2H_0^0(0, R; 1, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(3, \frac{1}{3}R) + 2C_{19} + \\
 & + H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_0^0(2, R) G_0^0(4, \frac{1}{3}R) + C_{20}].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \frac{2}{3}, 0, 0, 0, 0, 0) = & \frac{R^5}{12} \{ [3H_0^0(2, R; 2, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R)] G_0^0(0, \frac{1}{3}R) - \\
 & - [3H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R)] G_0^0(2, \frac{1}{3}R) - \\
 & - 2H_2^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R) G_2^0(0, \frac{1}{3}R) - 2H_2^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_2^0(2, \frac{1}{3}R) \}.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \frac{2}{3}, 0, 0, 0, 1, 0) = & \frac{R^6}{24} \{ [3H_0^0(2, R; 3, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 3, \frac{1}{3}R)] G_0^0(0, \frac{1}{3}R) + \\
 & + [3H_0^0(2, R; 2, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R)] G_0^0(1, \frac{1}{3}R) - \\
 & - [3H_0^0(2, R; 1, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 1, \frac{1}{3}R)] G_0^0(2, \frac{1}{3}R) - \\
 & - [3H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R)] G_0^0(3, \frac{1}{3}R) - \\
 & - 2H_2^0(0, R; 3, \frac{1}{3}R) G_2^0(0, \frac{1}{3}R) - 2H_2^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R) G_2^0(1, \frac{1}{3}R) + \\
 & + 2H_2^0(0, R; 1, \frac{1}{3}R) G_2^0(2, \frac{1}{3}R) + 2H_2^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_2^0(3, \frac{1}{3}R) \}.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \frac{2}{3}, 0, 0, 0, 2, 0) = & \frac{R^7}{48} \{ [3H_0^0(2, R; 4, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 4, \frac{1}{3}R)] G_0^0(0, \frac{1}{3}R) + \\
 & + 2[3H_0^0(2, R; 3, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 3, \frac{1}{3}R)] G_0^0(1, \frac{1}{3}R) - \\
 & - 2[3H_0^0(2, R; 1, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 1, \frac{1}{3}R)] G_0^0(3, \frac{1}{3}R) - \\
 & - [3H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R)] G_0^0(4, \frac{1}{3}R) - \\
 & - 2H_2^0(0, R; 4, \frac{1}{3}R) G_2^0(0, \frac{1}{3}R) - 4H_2^0(0, R; 3, \frac{1}{3}R) G_2^0(1, \frac{1}{3}R) + \\
 & + 4H_2^0(0, R; 1, \frac{1}{3}R) G_2^0(3, \frac{1}{3}R) + 2H_2^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_2^0(4, \frac{1}{3}R) \}.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(2, 0, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, 0, 0, 0) = & \frac{R^5}{12} \{ [3H_0^0(2, R; 2, \frac{1}{3}R) - H_0^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R)] G_0^0(0, R) - \\
 & - [3H_0^0(0, R; 2, \frac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R)] G_0^0(2, R) - \\
 & - 2H_2^0(2, R; 0, \frac{1}{3}R) - G_2^0(0, R) + 2H_2^0(0, R; 0, \frac{1}{3}R) G_2^0(2, R) \}.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I(2, 0, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 1, 0) = & \frac{R^6}{120} \{ 5[3H_0^0(2, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - H_0^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(0, R) - \\
& - 5[3H_0^0(0, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(2, R) + \\
& + 3[5H_1^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 3H_1^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_1^0(0, R) - \\
& - 3[5H_1^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 3H_1^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_1^0(2, R) - \\
& - 10H_2^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R)G_2^0(0, R) + 10H_2^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)G_2^0(2, R) - \\
& - 6H_3^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_3^0(0, R) + 6H_3^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_3^0(2, R) \}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I(2, 0, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 2, 0) = & \frac{R^8}{1120} \{ 7[5H_0^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(0, R) - \\
& - 7[5H_0^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(2, R) + \\
& + 14[5H_1^0(2, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 3H_1^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R)]G_1^0(0, R) - \\
& - 14[5H_1^0(0, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 3H_1^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)]G_1^0(2, R) - \\
& - 20H_2^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_2^0(0, R) + 20H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_2^0(2, R) - \\
& - 28H_3^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R)G_3^0(0, R) + 28H_3^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)G_3^0(2, R) - \\
& - 8H_4^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_4^0(0, R) + 8H_4^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_4^0(2, R) \}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I(2, 0, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 0, 2) = & \frac{R^8}{1120} \{ 7[5H_0^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(0, R) - \\
& - 7[5H_0^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(2, R) - \\
& - 14[5H_1^0(2, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 3H_1^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R)]G_1^0(0, R) + \\
& + 14[5H_1^0(0, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 3H_1^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)]G_1^0(2, R) - \\
& - 20H_2^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_2^0(0, R) + 20H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_2^0(2, R) + \\
& + 28H_3^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R)G_3^0(0, R) + 28H_3^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)G_3^0(2, R) - \\
& - 8H_4^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_4^0(0, R) + 8H_4^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)G_4^0(2, R) \}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I(2, 0, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 2, 2) = & \frac{R^{10}}{1\,034\,880} \{ 231[35H_0^0(2, R; 6, \tfrac{1}{3}R) - 35H_0^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) + \\
& + 21H_0^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 5H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(0, R) - \\
& - 231[35H_0^0(0, R; 6, \tfrac{1}{3}R) - 35H_0^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) + \\
& + 21H_0^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 5H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_0^0(2, R) - \\
& - 770[21H_2^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - 18H_2^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) + \\
& + 5H_2^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_2^0(0, R) + \\
& + 770[21H_2^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - 18H_2^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) + \\
& + 5H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_2^0(2, R) + \\
& + 72[77H_4^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 35H_4^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_4^0(0, R) - \\
& - 72[77H_4^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 35H_4^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)]G_4^0(2, R) \}.
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 0, 0) &= \\
 &= \frac{R^5}{90} [45H_0^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 15H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R) - 15H_0^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) + \\
 &\quad + 5H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R) + 4H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 1, 0) &= \\
 &= \frac{R^6}{18} [45H_0^0(2, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 15H_0^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R) - 15H_0^0(0, R; 3, \tfrac{1}{3}R) + \\
 &\quad + 5H_0^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R) + 4H_2^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 1, 1) &= \\
 &= \frac{R^7}{2520} [315H_0^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - 210H_0^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) + 63H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R) - \\
 &\quad - 105H_0^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) + 70H_0^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 21H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R) + \\
 &\quad + 56H_2^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - 24H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 2, 0) &= \\
 &= \frac{R^7}{840} [105H_0^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - 21H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R) - 35H_0^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) + \\
 &\quad + 7H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R) + 8H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 2, 1) &= \\
 &= \frac{R^8}{5040} [315H_0^0(2, R; 5, \tfrac{1}{3}R) - 210H_0^0(2, R; 3, \tfrac{1}{3}R) + 63H_0^0(2, R; 1, \tfrac{1}{3}R) - \\
 &\quad - 105H_0^0(0, R; 5, \tfrac{1}{3}R) + 70H_0^0(0, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 21H_0^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R) + \\
 &\quad + 56H_2^0(0, R; 3, \tfrac{1}{3}R) - 24H_2^0(0, R; 1, \tfrac{1}{3}R)].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(1, 1, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, 0, 0, 2, 2) &= \\
 &= \frac{R^9}{10080} [315H_0^0(2, R; 6, \tfrac{1}{3}R) - 315H_0^0(2, R; 4, \tfrac{1}{3}R) + 189H_0^0(2, R; 2, \tfrac{1}{3}R) - \\
 &\quad - 45H_0^0(2, R; 0, \tfrac{1}{3}R) - 105H_0^0(0, R; 6, \tfrac{1}{3}R) + 105H_0^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - \\
 &\quad - 63H_0^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) + 15H_0^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R) + 108H_2^0(0, R; 4, \tfrac{1}{3}R) - \\
 &\quad - 72H_2^0(0, R; 2, \tfrac{1}{3}R) + 20H_2^0(0, R; 0, \tfrac{1}{3}R)].
 \end{aligned}$$

$$C_i = 3H_1^0 G_1^0 G_1^0 + 5H_2^0 G_2^0 G_2^0 + 7H_3^0 G_3^0 G_3^0 + 9H_4^0 G_4^0 G_4^0$$

az illető sorban levő argumentumokkal.

## IRODALOM

- [1] *F. Hund*, Z. Phys., 73, 1, 1931.
- [2] *R. S. Mulliken*, J. Chem. Phys., 1, 492, 1933; 3, 375, 1935, Chem. Rev., 9, 347, 1931.
- [3] *E. Hückel*, Z. Phys., 60, 423, 1930; 72, 310, 1931.
- [4] *T. Lennard—Jones*, Trans. Faraday Soc., 25, 668, 1929.
- [5] *L. Pauling—E. B. Wilson*, Introduction to Quantum Mechanics Mc Graw-Hill Book Comp. Inc., New York and London, 1935. S. 347.
- [6] *F. Berencz*, Acta Phys. Hung., 16, 49, 1963.
- [7] *H. Sponer*, Molekülspektren, Springer, Berlin, 1935.
- [8] *M. Kotani, A. Amemiya und T. Simose*, Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 20, extra No. 1, 1938; 22, extra No 2, 1940.
- [9] *J. Miller, I. M. Gerhauser, F. A. Matsen*, Quantum Chemistry Integrals and Tables, University of Texas Press, 1959.



# BELSŐ SÚRLÓDÁSI EGYÜTTHATÓ MEGHATÁROZÁSA CSÚSZÓ SÍKLAPOS VISZKOZIMÉTERREL\*

SZABÓ PIROSKA

Építőipari és Közlekedési Műszaki Egyetem Kísérleti Fizikai Intézete

Új (csúszó síklapos) viszkozimétert ismertetünk. Leírjuk, hogy hogyan lehet ezzel belső súrlódási együtthatót mérni. Közöljük azt, hogy egyes bitumenek viszkozitása hogyan függ a hőmérséklettől.

## Bevezetés

Néhány évvel ezelőtt méréseket végeztünk az Építőipari és Közlekedési Műszaki Egyetem Kísérleti Fizikai Intézetének műhelyében készült helyi tervezésű kapilláris viszkoziméterrel bitumenek és táblaparaaffinok viszkozitására vonatkozólag [1].

Gyulai Zoltán professzor gondolata volt, hogy szerkesszünk olyan eszközt, amellyel belső súrlódási együtthatót az ezt eredetileg definiáló, Newtontól származó összefüggés alapján lehet meghatározni. Az említett reláció arra az erőre, az úgynevezett belső súrlódási erőre vonatkozik, ami akkor lép fel, ha folyadékrészek szomszédjukhoz képest megváltoztatják a helyzetüket. A

$$P = \eta F \frac{dv}{dr} \quad (1)$$

belső súrlódási erő az  $\eta$  viszkozitású mozgó anyag olyan  $F$  területén lép fel, amely olyan sík felületen van, amelyben benne fekszik a  $v$  sebességvektor és amelyre merőleges az  $r$ . ( $v$  az  $F$  sebességét jelöli.)

A szakirodalomban [2] olvashatjuk, hogy eddig nem állt rendelkezésünkre olyan műszer, amellyel közvetlenül Newton törvénye alapján lehetne belső súrlódási együtthatót mérni. Intézetünkben készült ilyen Lévius Ernő elgondolása szerint. A műszert csúszó síklapos viszkoziméternek neveztem el.

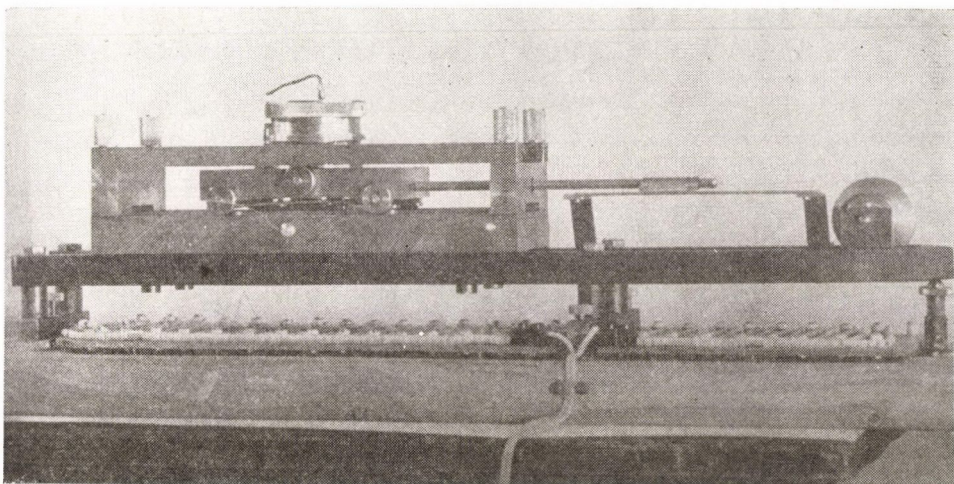
A viszkoziméter megbízhatóságára vonatkozó próbamérést olyan műszerolajon végeztem szobahőmérsékleten, amelynek 20 °C-hoz tartozó viszkozitása 6–9 nagyságrenddel kisebb, mint a széles hőmérsékleti intervallumban mérendő bitumenek viszkozitása. A próbamérésből 13 centipoise adódott. Az Áfor-katalógus alapján a szereplő olajnak a viszkozitása 23 és 32 centipoise közé esik.

## A csúszó síklapos viszkoziméter leírása E viszkoziméterrel történő mérés menete

Az említett eszköznek a lényege egy nyugvó vízszintes síklap, amely fölött egy vele párhuzamos, tőle beállítható távolságra ( $dr$ ) levő ismert területű ( $F$ ) téglalapot mozgatunk egyenletesen ( $v$  sebességgel). A két lap között a kérdéses viszkozitású

\* Érkezett 1964. dec. 11.



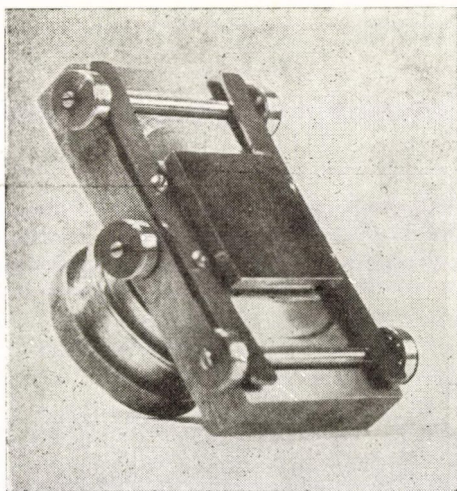


1. ábra. Csúszó síklapos viszkoziméter. Fatalpán eternitre szerelt fűtőtest van

anyag tölti ki. A  $v=s/t$  sebesség meghatározása stopperórának és annak a milliméterskálának a segítségével történik, amelyik a nyugvó síklaphoz van erősítve. E skála fölött mozdul el a mozgó téglalaphoz erősített jel. A téglalap mozgatása a téglalaphoz erősített rúdhoz kötött zsineg közvetítésével történik. Ezt a zsinetet vízszintes tengelyű csigán vetjük át és akkora tömeget akasztunk rá, amelynek a súlya már rövid távolság után egyenletes mozgást eredményez. Ebben az esetben

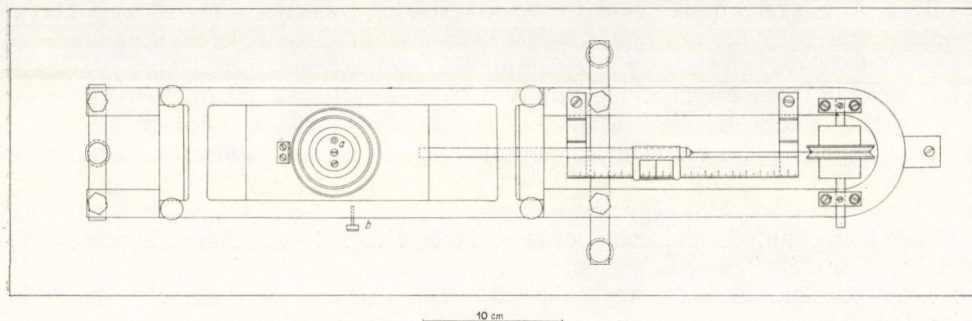
a téglalap csúszását előidéző erő ellentétben egyenlő a két lap között levő anyagtól függő, a csúszás miatt  $F$ -en fellépő belső súrlódási erővel,  $P$ -vel és a  $dv$ -t megadja a téglalap sebessége. Ennek az utóbinak az a magyarázata, hogy mindkétfémlaphoz tapad a köztük levő anyag, minek következtében a téglalappal együtt mozog  $v$  sebességgel a kitöltő anyagnak kb. monomolekuláris rétege és a nyugvó síklapon egy hasonló rétegnek  $O$  sebessége van. A  $dr$  vastagságú rétegen belül az anyag részecskéinek sebessége lineárisan csökken  $v$ -ről  $O$ -ra. Tehát  $dv=v-O=v$ .

Az az acéltömb (lásd 1. ábra), aminek teteje az említett nyugvó síklap, három csavarlábbon nyugszik (a fényképen — 1. ábra — az egyik baloldalon, a másik kettő a középtől jobbra látható). A csavarlábak lehetővé teszik azt, hogy a mérések előtt az eszközt belibellázhassuk. A síklap széle sínnek van kiképezve. Erre a sínre helyez-

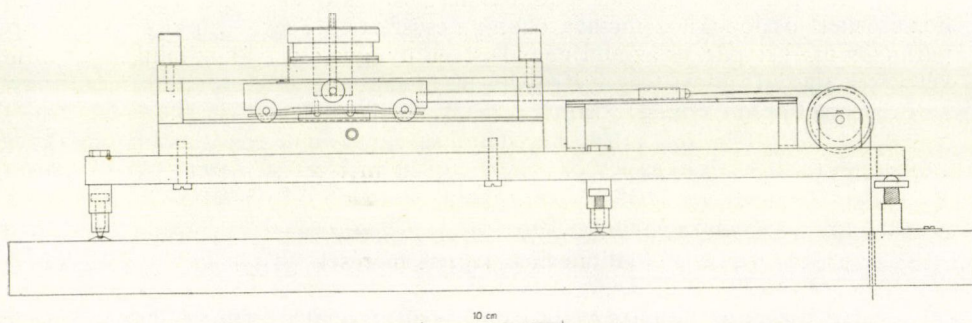


2. ábra. A csúszka a hat kerékkel, a téglalappal és az ezt mozgatni tudó csavarmikrométerrel



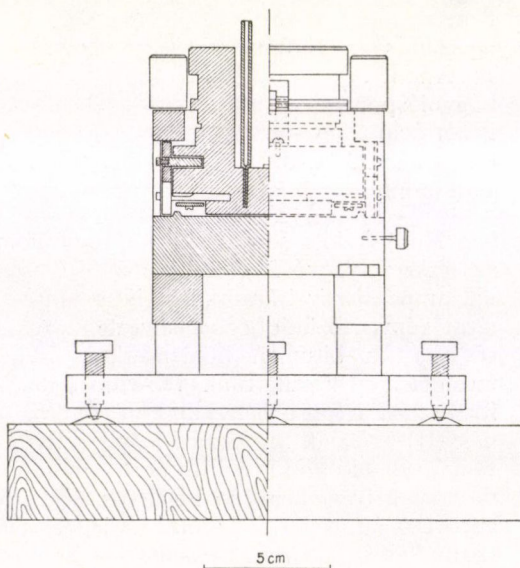


3. ábra. A viszkoziméter felülnézete



4. ábra. A viszkoziméter előlnézete

5. ábra. A viszkoziméter oldalnézete (fél-metszet-, félnézeti)



zük azt a négykerekű alkotmányt (röviden csúszkát), amelyre a téglalap egy csavar-mikrométerrel együtt van rászerezve. (Ezt a csúszkát külön is lefényképeztük, mégpedig felfordítva, azért, hogy a téglalap jól látható legyen. Lásd 2. ábra.) A csavar-mikrométer forgatásával a téglalapot fel-le mozgathatjuk és minden helyzetben leolvashatjuk a téglalaphoz a nyugvó laptól való távolságát. Beállítjuk a kívánt  $dr$  távolságot, majd a csúszkát leemelve, bevonjuk a nyugvó lapot is és a téglalapot is a kérdéses viszkozitású anyaggal úgy, hogy a két réteg együttes vastagsága kissé túlhaladhatja  $dr$ -et. Majd egymásra helyezzük a két bekent lapot. A sín és a kerekek között hézag mutatkozik, azaz a csúszka kerekei nem ülnek a sínen. Ennek oka az, hogy a folyadék réteg  $dr$ -nél vastagabb. A csúszka tetejére ólomlemezeket, azaz nehezekeket teszünk. Ezeknek súlya alatt lassan kipréselődik a felesleges anyag a két lap közül és a csúszka lesüllyed annyira, hogy a négy kerék ráül a sínre. Azt, hogy a mérés alatt, azaz a téglalap csúsztatása közben a  $dr$ , vagyis az anyagréteg vastagsága állandó maradjon (ne emelkedhessék fel a csúszka), úgy biztosítjuk, hogy a talphoz erősített oszlopokhoz rácsavarozunk a csúszka fölé egy — a nyugvó alaplappal párhuzamos — sínpárt és az alul négy kereken nyugvó csúszkához felül szerelt mindkét kerék (lásd 1. ábra) tengelyét olyan magasságba emelve erősítjük meg, hogy e kerekek a felső sínt érintsék. Mind a hat kerék gördülőcsapágyas.

Az eszközről három rajtot készítettünk: egy felülnézetet (lásd 3. ábra), egy előlnézetet (lásd 4. ábra) és egy oldalnézetet — félmetset-, félmetet — (lásd 5. ábra).

### Bitumenen végzett mérések

A leírt eszközzel bitumen viszkozitási együtthatóját mértem. A használt dernai bitumen jellemző adatai:

Lágyuláspont (gyűrűs-golyós) .....	44 °C
Penetráció 25 °C-on .....	130-0,1 mm
Duktilitás 25 °C-on .....	1000 mm
Töréspont .....	-18 °C
Lágyuláspont	51 °C
Penetráció 25 °C-on	} párolgási veszteség után .....
Duktilitás 25 °C-on	
Töréspont	
	74-0,1 mm
	364 mm
	-22 °C

Hogy a bitumen viszkozitásának hőmérséklettől való függését vizsgálhassam, az eszköz nyugvó fémtömbje alá fűtőtestet helyeztem, ezt változtatható ellenállással, ampermérővel áramkörbe iktattam és a fűtőtestet az eszközzel együtt termosztátot képviselő fadobozba helyeztem. A doboz tetején üvegablak van. Hogy a mérés alatt a bitumen hőmérsékletét minél pontosabban meghatározhassam, két termoelemet készítettünk réz-konstantán fém párból. Az egyiknek (I) az egyik forrasztási helyét a csúszkába fűrt lyukba (amit a 3. ábrán  $a$ -val jelöltünk), a másiknak (II) az egyik forrasztási helyét a nyugvó fémtömbbe fűrt lyukba (amit a 3. ábrán  $b$ -vel jelöltünk) szorítottam fémcsapocskával. Mindkét termoelem másik forrasztási helye (ellenőrző higanyos hőmérővel együtt) ólomporral körülvéve olyan epruvettában van, mely olvadó jéggel teli termoszba süllyed. Mérés csak akkor kezdődhetik, ha a termoelemek elég hosszú időn át konstans hőmérsékletet mu-



tatnak. Mérés alatt a bitumen hőmérsékletének a két termoelem által mutatott hőmérsékletek középértékét tekintettem.

A következőkben a mérési adatokat közlöm.

A csúszó téglalap területe:

$$F = 5 \cdot 4,98 \text{ cm}^2 = 24,9 \text{ cm}^2$$

(a téglalap oldalait tolómérővel mértük).

A csúsztató erő:

$$P = 2 \text{ kp} = 2 \cdot 10^3 \cdot 981 \text{ din}$$

A bitumen-réteg vastagsága:

$$dr = 0,245 \text{ mm} = 0,0245 \text{ cm}$$

Hőmérséklet						Idő	Út	Belső súrlódási együttható
I. termoelemhez kapcsolt galvanométeren <i>skr</i> *	°C	II. termoelemhez kapcsolt galvanométeren <i>skr</i>	°C	Közép-érték °C	Középértékhez tartozó $1/T$ $\frac{1}{^\circ K}$	<i>t</i>  <i>sec</i>	<i>s</i>  <i>cm</i>	$\eta = \frac{P}{F} dr \frac{t}{s}$  <i>poise</i>
46,5	29,90	47,2	30,50	30,20	0,003296	18 000	1,94	$1,79 \cdot 10^7$
41,2	26,75	43,0	28,00	27,38	0,003327	14 400	0,19	$1,46 \cdot 10^8$
55,4	35,15	56,5	35,95	35,55	0,003239	7 200	1,35	$1,03 \cdot 10^7$
47,1	30,25	48,0	31,00	30,63	0,003292	5 400	0,19	$5,49 \cdot 10^7$
38,6	25,20	40,7	26,70	25,95	0,003343	18 000	0,16	$2,17 \cdot 10^8$
40,5	26,35	43,4	28,30	27,33	0,003328	25 200	0,31	$1,57 \cdot 10^8$
48,3	30,90	52,3	33,50	32,20	0,003275	14 400	1,22	$2,28 \cdot 10^7$
40,7	26,40	45,8	29,70	28,05	0,003320	10 800	0,17	$1,23 \cdot 10^8$
47,2	30,30	52,8	33,60	31,95	0,003278	7 200	0,63	$2,21 \cdot 10^7$
47,4	30,45	51,3	32,90	31,68	0,003280	3 600	0,12	$5,79 \cdot 10^7$
49,5	31,65	56,5	35,90	33,78	0,003258	3 600	0,18	$3,86 \cdot 10^7$
56,5	35,80	58,2	36,90	36,35	0,003231	7 200	1,24	$1,12 \cdot 10^7$
56,7	35,90	58,3	37,00	36,45	0,003230	5 400	1,24	$8,41 \cdot 10^6$
48,2	30,90	48,2	31,10	31,00	0,003288	9 000	0,11	$1,58 \cdot 10^8$
47,5	30,50	47,3	30,60	30,55	0,003293	23 400	0,35	$1,29 \cdot 10^8$
50,7	32,35	50,1	32,20	32,28	0,003274	14 400	0,39	$7,13 \cdot 10^7$
59,4	37,50	58,5	37,10	37,30	0,003221	12 600	1,93	$1,26 \cdot 10^7$
67,2	42,10	65,9	41,40	41,75	0,003176	10 800	1,85	$1,13 \cdot 10^7$
77,7	48,30	76,5	47,50	47,90	0,003115	1 800	3,68	$9,44 \cdot 10^5$
78,1	48,50	75,5	46,90	47,70	0,003117	2 340	1,69	$2,67 \cdot 10^6$
76,3	47,40	74,9	46,60	47,00	0,003123	5 760	5,82	$1,91 \cdot 10^6$
85,7	53,00	84,1	51,90	52,45	0,003071	1 200	4,28	$5,41 \cdot 10^5$

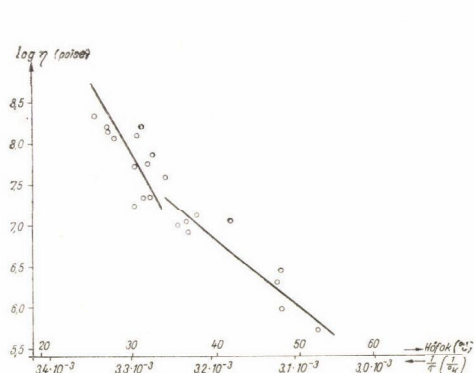
\* *skr* = skálárész

$1/T$  és  $\log \eta$  összetartozó értékeiből adódó értékpárokat koordinátarendszerben ábrázoltam (lásd 6. ábra).

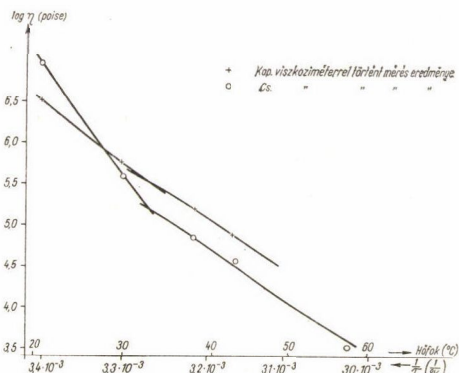
Megemlítem, hogy e közölt mérésorozatot megelőzően ugyanegy bitumenen összehasonlító méréseket végeztem a kapillárvizkoziméterünkkel és e most ismertett csúszó síklapos viszkoziméterrel. Ezeknek az összehasonlító méréseknek az eredményét a 7. ábrán látható grafikonok tüntetik fel.

Megköszönöm Kertész Alajos és Asztalos Károly műszerészeknek, Cseh-Szombathy Lászlóné, Mócsa István és Laczik István laboránsoknak a segítségüket.

Hálás köszönetemet fejezem ki Gyulai Zoltán professzor úrnak, aki az egész munka alap gondolatát adta és a méréseket végig érdeklődéssel támogatta.



6. ábra. A csúszó síklapos viszkoziméterrel történt mérések szerint egy dernai bitumen belső súrlódási együtthatójának logaritmusai mint az  $1/T$  függvénye



7. ábra. Bitumenen kapilláris viszkoziméterrel és csúszó síklapos viszkoziméterrel történt mérések alapján  $\log \eta$  mint az  $1/T$  függvénye

## IRODALOM

[1] J. Zemplén und P. Szabó, Bestimmung der Viskosität der Bitumina. Kolloid-Zeitschrift 153, 36, 1957.

M. Zemplén Jolán és Szabó Piroška, Bitumenek belső súrlódási együtthatójának meghatározása. Magyar Fizikai Folyóirat 5, 325, 1957.

P. Szabó, Messung der Viskosität von festem Paraffin. Kolloid-Zeitschrift 163, 141, 1959.

Szabó Piroška, A szilárd paraffin belső súrlódási együtthatójának meghatározása. Magyar Fizikai Folyóirat 8, 125, 1960.

[2] Vámos Endre: Ásványolajtermékek viszkozitása. 5. old. Nehézipari Könyv- és Folyóirat Kiadó Vállalat, 1951.



# A RELATIVISZTIKUS BOLTZMANN-EGYENLETRŐL I.\*

ABONYI IVÁN

Eötvös Loránd Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

Az alábbiakban a Boltzmann-egyenlet relativisztikus általánosítására tett javaslatokat tanulmányozzuk, elsősorban ütközésmentes esetben. Kimutatjuk, hogy a különböző alakban megadott általánosítások, amelyek különböző szerzőktől származnak, egyenértékűek, vagyis kizárólag az alkalmazott jelölésmódban térnek el egymástól. Vizsgálat tárgyává tesszük a Boltzmann-egyenletben szereplő tagok Lorentz-transzformációval szemben tanúsított viselkedését, valamint az eloszlásfüggvény transzformációs sajátságait.

## 1. Bevezetés

### A relativisztikus Boltzmann-egyenlet eddig javasolt alakjainak áttekintése

Mint ismeretes, a Boltzmann-egyenlet fontos szerepet játszik a kinetikus gázelméletben, mert — legalább is elvben — lehetővé teszi, hogy a részecskék koordinátatérbeli és sebességtérbeli (impulzustérbeli) eloszlását meghatározzuk és ezáltal a rendszer jellemző tulajdonságait kvantitatív módon megismerjük.

A Boltzmann-egyenletet a klasszikus esetben írjuk fel most, részben a fogalmak, részben a jelölésmód lerögzítése érdekében:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla f + \frac{1}{m} \mathfrak{F} \nabla_v f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ütk}} \quad (1)$$

ahol  $f = f(r, t, v)$  az egy-részecske—eloszlásfüggvény, ami a részecske  $r$  helyétől,  $v$  sebességétől és a  $t$  időtől függ. Az  $f$  fizikai jelentését az

$$N = \int d^3 r \int d^3 v f(r, t, v) \quad (2)$$

normálási feltétel szolgáltatja, ahol  $N$  a szóbanforgó rendszer részecskéinek száma. A továbbiakban természetesen feltesszük, hogy a rendszer egyforma részecskékből áll. Az (1) egyenletben alkalmazott további jelölések:

$$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \right\}, \quad \nabla_v = \left\{ \frac{\partial}{\partial v} \right\},$$

$m$  a részecskék tömege,  $\mathfrak{F}$  a részecskére ható erő.

A Boltzmann-egyenlet elnevezést általában arra az esetre tartják fenn, amikor  $\mathfrak{F}$  csak külső erőket tartalmaz. Az alkalmazások szempontjából olyan fontos esetben, mint az elektromágneses erőterbe helyezett plazma esetében, különös figyelmet kell szentelnünk az  $\mathfrak{F}$  kifejezésének. Egyensúlyban levő plazma esetében  $\mathfrak{F}$ -nek csak a külső erőteréből származó járuléka van, perturbált állapotban a plazmában kialakuló tértöltések és áramok  $\mathfrak{F}$ -hez további járulékot adnak, ami természete-

\* Érkezett 1964. dec. 19.

sen közvetett módon (a Maxwell-egyenleteken keresztül) a perturbált eloszlásfüggvényre vezethető vissza. Ha tehát az ütközési tagot, illetve a plazma alkotórészeinek elektromágneses kölcsönhatását a Maxwell-egyenletekből származtatjuk, egyéb kölcsönhatástól viszont eltekintünk, az így nyert egyenletet Vlaszov-egyenletnek\* nevezzük. Ez a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla f + \frac{1}{m} \mathcal{F} \nabla_v f = 0 \quad (3)$$

alakban írható, ahol  $\mathcal{F}$  a külső erőter mellett még a perturbált töltés- és árameloszlásból származó ponderomotoros erőket is tartalmazza és ennél fogva (3) a Maxwell-egyenletekkel csatolt egyenletrendszert képez.

Mint ismeretes, a Boltzmann-egyenletből kiindulva egyszerűen származtathatjuk a makroszkopikus egyenleteket, amik a töltés, a tömeg, az impulzus, az energia stb. transzportját írják le. Ezeket az egyenleteket nyomaték-egyenleteknek is nevezik, mert az eloszlási függvény és a sebességvektor adott függvényének a szorzataiként értelmezett, átlagolt mennyiségekre vonatkoznak. Ezekből az egyenletekből, amelyek az általános esetben végtelen egyenletből álló, csatolt, hierarchikus rendszert képeznek, a plazma makroszkopikus viselkedése elvben meghatározható.

A Boltzmann-egyenlet másik, korántsem egyetlen, de a gyakorlat szempontjából döntő fontosságú alkalmazási területe a plazmarezgések tárgyalása, amikor a jelenségek magyarázata a diszperziós reláció levezetése érdekében éppen a Boltzmann-egyenletből indulnak ki. (Egyszerűség kedvéért most csak *Bernstein* [1] cikkére utalunk, a későbbiek folyamán erre a kérdésre részletesen is visszatérünk.)

Az alábbiakban a Boltzmann-egyenlet relativisztikus általánosításának problémáját kívánjuk megvizsgálni, előbb az alapegyenlet elvi problémáira szorítkozva, később az alkalmazási területeken hozott módosítások és korrekciók értékelésére is kitérve.

Meg kell említenünk, hogy a relativisztikus sokaságok statisztikai tárgyalása igen bonyolult kérdéseket vet fel. A klasszikus elmélet relativisztikus általánosítása során ugyanis nemcsak a relativisztikus kinematika megkövetelte módosítások (a tömeg sebességfüggése, vagy ha tetszik: a határsebesség fogalmának megjelenése) jelentik az eltérést a klasszikus alapoktól, hanem magának a kölcsönhatásnak a leírása is kérdésessé válik. E kérdést érintve megemlítjük, hogy a relativisztikus soktestprobléma tárgyalásában úttörő elgondolásokkal jelentkezett *Bergmann* [2], *Havas* és *Krizan* [3], akik éppen a kölcsönhatás új leírására tettek javaslatokat. Az eddig említett problémák sorához még egyet szeretnénk hozzáfűzni. A valószínűségben relativisztikus energiatartományban természetesen okvetlenül figyelembe kell venni bizonyos sugárzási, sőt párkeltési folyamatokat is, amelyek leírása a kvantumelektrodinamika hatáskörébe tartozik. Másszóval a relativisztikus plazma leírása tulajdonképpen az elektromágneses kölcsönhatásban álló elemek kvantumstatistikájától lenne várható. A kérdés teljes egzaktságában természetesen rendkívül bonyolult, másrészt bizonyos esetekben megelégedhetünk szerényebb közelítéssel is. Ezért most ezt az általános problémát nem érintjük.

A speciális relativitáselmélet hozta korrekciók és elvi módosítások feltárásnak megszokott útja a bevált klasszikus törvényszerűségek formái átalakítása a

\* Az irodalomban gyakran ütközésmentes Boltzmann-egyenletnek vagy Boltzmann–Vlaszov-egyenletnek is nevezik.



megváltozott invarianciakövetelményeknek megfelelően. A Boltzmann-egyenlet esetében az első lépés nem újkeletű. *Lichnerovicz* és *Marrot* [4] 1940-ben közölt cikkükben megmutatták, hogy Boltzmann eredeti gondolatmenetét követve, csak most a relativisztikus mozgástörvényekre támaszkodva leszámaztatható a Boltzmann-egyenlet relativisztikus variánsa, amelyet

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla f + \mathfrak{F} \nabla_p f = \int (f' f'_1 - f f_1) W d\sigma dw_1 \quad (4)$$

alakban adtak meg, ahol

$$p = m_0 c \beta = m_0 \frac{v}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}},$$

$$f = f(r, t, p), \quad f' = f(r, t, p'),$$

$$f_1 = f(r, t, p_1), \quad f'_1 = f(r, t, p'_1),$$

$dw_1$  a  $p_1$  változó szerinti integrálás térfogateleme,  $W$  a két összeütköző részecske (relativisztikus sebességösszetevés szerint nyert) relatív sebessége;  $p$  és  $p_1$ , illetve  $p'$  és  $p'_1$  az összeütköző partnerek ütközés előtti, illetve ütközés utáni impulzusa, továbbá  $d\sigma$  a  $W$ -re merőleges síkon a felületelem.

A (4) egyenletben szereplő mennyiségek transzformációs karaktere nem volt kérdéses, *Lichnerowicz* és *Marrot* erre a problémára még nem tért ki.

Tudomásunk szerint, először *Taub* [5] érintette ezt a kérdést 1948-ban, amikor a Boltzmann-egyenlet relativisztikus alakjára is javaslatot tett. Ugyanilyen jelölések alkalmazásával, de más eljárással nyúlt a kérdéshez *Clemmow* és *Willson* 1957-ben. *Clemmow* és *Willson* az ütközésmentes esetben a relativisztikus Boltzmann-egyenletet a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c(1 + w^2)^{-1/2} (w \nabla) f + (m_0 c)^{-1} \{(\mathfrak{F} \nabla_w) + (\nabla_w \mathfrak{F})\} f = 0 \quad (6)$$

alakban írták fel, ahol

$$w = v c^{-1} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} \quad (7)$$

az ún. *redukált sebesség*. A (6) egyenlet jelöléseiben is megegyezik a *Taub* által leszámaztatott egyenlettel. A (6) egyenlet természetesen csak azonos  $m_0$  nyugalmi tömeggel rendelkező részecskesokaságra vonatkozik, amelynek  $f = f(r, t, w)$  eloszlásfüggvényére még a

$$N = \int d^3 r \int d^3 w f(r, t, w) \quad (8)$$

normálási feltételt kötjük ki ( $N$  a rendszer alkotórészeinek a száma, ami a tárgyalás során állandó marad!)

*Taub* megállapítja, hogy az  $f(r, t, w)$  eloszlási függvény a Lorentz-transzformációkkal szemben invariáns skalárként viselkedik.

1958-ban *Ken-iti Goto* [7] szembeszökően relativisztikus alakban írta fel a Boltzmann-egyenletet:

$$\left\{ u_s \frac{\partial}{\partial x_s} + m_0^{-1} K_s \frac{\partial}{\partial u_s} \right\} f = 0, \quad (9)$$

ahol  $u_s$  sebesség,  $K_s$  az erő négyesvektora, az  $f$  eloszlási függvényt pedig mint az  $x_s$  pozíció (hely- és idő) négyesvektor és az  $u_s$  sebesség négyesvektor nyolcváltozós függvényének tekintjük. Mindig figyelembe kell vennünk azonban azt, hogy az  $u_s$  négy komponense nem független az

$$u_s u_s = -c^2 \quad (10)$$

reláció miatt.

A relativisztikus Boltzmann-egyenlet számára még egy, az előbbiektől lényegesen eltérő alakot is ismerünk. Ez *Linharttól* származik [8]. Ez az alak a  $v$  hármassebességet szerepelteti:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (v \nabla) f + (m_0 \gamma)^{-1} F_e (\delta_{e\sigma} - c^{-2} v_e v_\sigma) \frac{\partial f}{\partial v_\sigma} = 0 \quad (11)$$

ahol

$$\gamma = \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2}, \quad (12)$$

és

$$\mathfrak{F} = \{F_\sigma\} = -e \nabla \Phi - \frac{e}{c} \dot{A} + \frac{e}{c} v \times \text{rot } \mathfrak{A},$$

hogy ebben az esetben az erőt a  $\Phi$  és  $\mathfrak{A}$  elektromágneses potenciálokkal is kifejezzük. A kétszer előforduló görög indexekre egytől háromig összegezni kell. A (11) egyenlet természetesen ütközésmentes esetre, azonos  $m_0$  nyugalmi tömegű részekből álló rendszerre vonatkozik, s az eloszlási függvény fizikai értelmezése érdekében a

$$N = \int d^3 r \int d^3 v f(r, t, v)$$

normálási feltételt is előírjuk.

Látható, hogy a Boltzmann-egyenlet relativisztikus alakjai legalább is az első pillantásra nem egyformák. A különböző jelölésmódok mögött *fogalmi* különbségek is rejtőzhetnek. Ezért érdekesnek látszik a felsorolt egyenleteket egymással való kapcsolatuk szempontjából megvizsgálni, egyenértékűségük esetleges feltételeit megfogalmazni. Előbb azonban még az eloszlásfüggvénnyel kapcsolatos problémákat tekintjük át.

## 2. Az eloszlásfüggvény transzformációs sajátága

*J. L. Synge* nyomán [9] tekintsünk egy, adott  $m_0$  nyugalmi tömeggel rendelkező részecskékből álló gázt.

A fizikai történet színhelyeként vizsgáljuk a Minkowski-féle téridő-kontinuumot, s benne egy hipersíkot, amit az időjellegű  $n_r$  négyes egységvektor jellemez:

$$n_r n_r = -1 \quad n_4 > 0.$$



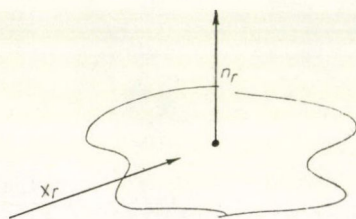
Legyen  $dS$  ennek a hipersíknak a felületeleme, amit a továbbiakban targetnek, vagy *céltáblának* nevezünk (1. ábra).

Az  $M_r$  impulzus négyesvektorok terében is tekintsünk egy  $C$  hiperfelületet, amit a részecskecsalád határoz meg, minthogy az  $M_r$  négyesimpulzusnak mindig ki kell elégítenie a

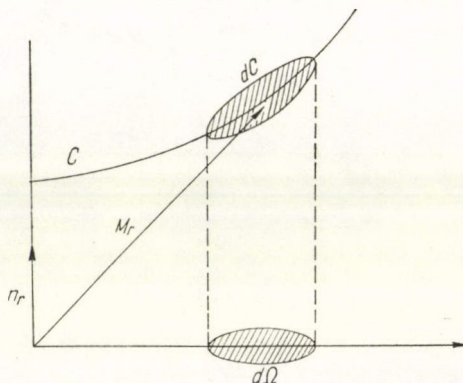
$$M_r M_r = -m_0^2 c^2$$

összefüggést (2. ábra).

Vizsgáljunk a  $C$  felületen egy  $dC$  felületelemet. Legyen  $v$  azoknak a világvonalaknak a száma, amelyek  $dS$  céltáblán áthaladnak és amelyeknek megfelelő impul-



1. ábra



2. ábra

zusvektorok végpontja  $dC$ -ben van. (Az impulzustér bázisvektorainak orientációját úgy választjuk meg, hogy azok egybeessenek a téridőkontinuum bázisvektorai-  
val, ez a további gondolatmenet általánosságát nem zavarja meg.)

Meg kívánjuk határozni az eloszlási függvény transzformációs sajátosságát, pontosabban azt, hogy hogyan függ ez az eloszlási függvény a téridőkontinuum bázisvektorai, vagyis a használt inerciális vonatkoztatási rendszer megválasztásától. Az  $N(x, M)$  eloszlási függvényt a következőképpen definiáljuk:

$N(x, M)$  azoknak a részecskéknak a  $v$  számát adja meg, amelyeknek négyes helyvektora a  $dS$ , négyes impulzusvektora a  $dC$  tartományban (illetve még pontosabban  $dC$ -nek a térszerű vetületében,  $d\Omega$ -ban) van:

$$v = N(x, M) dS d\Omega,$$

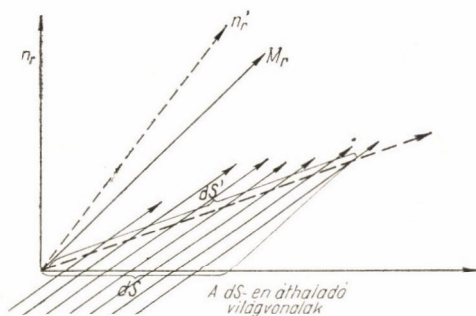
$$n_r[x, M, dS d\Omega]$$

Ez utóbbi kijelentés egyszerű rövid kifejezése annak, hogy  $n_r$  konkrét értékének lerögzítésével egy vonatkoztatási rendszert választunk és a fenti definíciót alkalmazzuk, hozzátéve még azt, hogy  $v$  arányos a  $dS d\Omega$  integrációs tartományokkal. Hasonlóan,  $n'_r$ -vel jellemzett vonatkoztatási rendszerre térve át, a fenti definíciót alkalmazva kapjuk, hogy

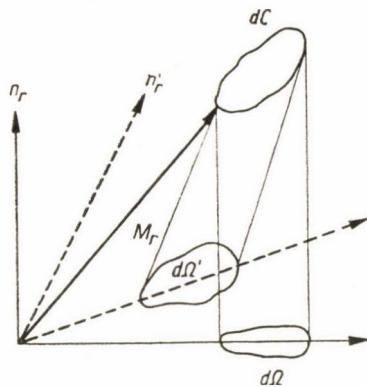
$$v' = N'(x', M') dS' d\Omega'$$

$$n'_r[x', M', ds' d\Omega'].$$

Feladatunk most az, hogy kapcsolatot teremtsünk  $n_r[x, M, dS d\Omega]$  és  $n'_r[x', M', dS' d\Omega']$  között oly módon, hogy  $[x, M, dS d\Omega]$  és  $[x', M', dS' d\Omega']$  ugyanazokat a részecskéket tartalmazza.



3. ábra



4. ábra

Miként a 3. ábráról is leolvashatjuk,  $dS$  és  $dS'$  között a kapcsolatot

$$dS' |M_r n'_r| = dS |M_r n_r| \quad (13a)$$

adja meg,  $n_r \rightarrow n'_r$  áttérés esetére (l. Synge [9]).

Másrészt, az impulzustérben a kérdéses vonatkoztatási rendszer változtatás a  $d\Omega$  megváltozását is előidézi, amit a 4. ábráról leolvasható módon

$$\frac{d\Omega'}{|M_r n'_r|} = \frac{d\Omega}{|M_r n_r|} \quad (13b)$$

alakban írhatunk fel (l. Synge [9]).

A (13a) és (13b) együttesen a

$$dS' d\Omega' = dS d\Omega$$

eredményre vezet. Minthogy a szerkesztés és a definíció alapján  $v \equiv v'$ , következésképpen

$$N'(x', M') = N(x, M),$$

ami azt jelenti, hogy az  $N(x, M)$  eloszlási függvény a vonatkoztatási rendszer megválasztásától, vagyis az  $n_r$  bázisvektorok orientációjától nem függ, tehát a Lorentz-transzformációval szemben invariáns skalárként viselkedik.

Megjegyezzük, hogy speciálisan választott rendszerben

$$dS = dx_1 dx_2 dx_3,$$

$$d\Omega = dM_1 dM_2 dM_3,$$

vagy

$$d\Omega = m_0^3 c^3 du_1 du_2 du_3,$$



ahol  $u\{u_1, u_2, u_3\}$  redukált sebesség. Gondolatmenetünk részleteredménye, hogy

$$dS d\Omega = \text{inv. skalár},$$

ebben a speciális esetben azt is jelenti, hogy

$$dx_1 dx_2 dx_3 d \frac{v_1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} d \frac{v_2}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} d \frac{v_3}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} = \text{inv. skalár}.$$

### 3. A relativisztikus Boltzmann-egyenlet leszármaztatása

Az alábbiakban megkíséreljük felvázolni azt az eljárást, amely a relativisztikus Boltzmann-egyenletnek a bevezetésében felsorolt variánsai közül bármelyiket szolgáltatni tudja. Ezáltal a variánsok egyenértékűségét könnyen ellenőrizhetjük.

A követni kívánt módszer a klasszikus gondolatmenethez nagyon hasonló. Már most meg szeretnénk azonban jegyezni, hogy a Boltzmann-egyenletnek a Liouville-egyenletből való klasszikus származtatási módja feltételezi, hogy a rendszer fizikai viselkedését a Hamilton-formalizmus segítségével tárgyalni lehet. Ez a kérdés a relativisztikus statisztikában nem zárult még le teljesen, ehelyütt az idevágó irodalomból csak Kálmán [10], [11] Rund [14] és Havas [15] cikkeire utalunk.

Minthogy a gyakorlati alkalmazások jelenleg kétségkívül legfontosabb területén, az elektromágneses jelenségek, a plazmarezgések és a plazmában lejátszódó sugárzási jelenségek körében a felsorolt problémák nem kerülnek előtérbe, kiindulópontnak a külső elektromágneses térrel kölcsönhatásban álló relativisztikus részecskék Hamilton-függvényét vesszük:

$$H = \sum c \left\{ m_0^2 c^2 + \left( p - \frac{e}{c} \mathcal{A} \right)^2 \right\}^{1/2} + \sum e \Phi.$$

E dolgozat keretében csak a töltéseknek a külső elektromágneses térrel való kölcsönhatását kívánjuk figyelembe venni. Az ütközések és a töltések egymással való kölcsönhatásának szerepét jelen pillanatban elhanyagolhatónak tekintjük, mert célunkat, a Boltzmann-egyenlet relativisztikus alakjai kapcsolatának megállapítását már így is elérjük.

A  $H$  Hamilton-függvény segítségével levezethető

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3n} \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right\} = 0$$

Liouville-egyenletben, ahol  $F = F(t, q_1, \dots, q_{3n}, p_1, \dots, p_{3n})$  az ún. nagy-, vagy  $n$ -részecske eloszlásfüggvény ( $n$  a rendszer részecskéinek száma) a fenti közelítések végrehajtása  $n$  egyenletből álló egyenletrendszerhez vezet, amelyek egymástól függetlenül már csak az  $f_i = f_i(t, q_1, p_1)$  egyrészecske-eloszlási függvényekre vonat-

koznak:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \sum_{\lambda=1}^{3n} \left\{ \frac{\partial H^\circ(i)}{\partial p_\lambda} \frac{\partial f_i}{\partial q_\lambda} - \frac{\partial H^\circ(i)}{\partial q_\lambda} \frac{\partial f_i}{\partial p_\lambda} \right\} = 0, \quad (i=1, \dots, n)$$

$$\prod_{i=1}^n f_i = F,$$

$$\prod_{i=1}^n H^\circ(i) = H.$$

A relativisztikus Hamilton-függvény adott alakjának behelyettesítése és az  $i$  index elhagyása után a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{\lambda=1}^3 v_\lambda \frac{\partial f}{\partial v_\lambda} + e \sum_{\lambda} \left\{ \frac{1}{c} \sum_{\sigma} v_\sigma \frac{\partial A_\lambda}{\partial x_\sigma} + \frac{1}{c} (\mathbf{v} \times \text{rot } \mathfrak{A})_\lambda - \frac{\partial \Phi}{\partial x_\lambda} \right\} \frac{\partial f}{\partial p_\lambda} = 0 \quad (14)$$

egyenlethez jutunk, ahol

$$\mathbf{v} = \left\{ \frac{dq_1}{dt}, \frac{dq_2}{dt}, \frac{dq_3}{dt} \right\},$$

továbbá  $\mathfrak{A}$  és  $\Phi$  az elektromágneses vektor, ill. skalárpotenciál. A (14) egyenlet már majdnem a Boltzmann-egyenlet, mindössze a benne szereplő impulzusváltozóról kell a sebességváltozóra áttérni, hogy a szokásos jelölésekhez érkezzünk.

Ennek a változócserenek több lehetséges módja van:

1. bevezethetjük a klasszikus mechanika közönséges hármassebességét a

$$p_\lambda = m_0 \gamma v_\lambda + \frac{e}{c} A_\lambda \quad (\lambda = 1, 2, 3) \quad (15)$$

összefüggéssel, ahol

$$\gamma = \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2}; \quad (16)$$

2. bevezethetjük a redukált sebességet a

$$p_\lambda = m_0 c w_\lambda + \frac{e}{c} A_\lambda \quad (\lambda = 1, 2, 3) \quad (17)$$

relációval;

3. közvetett, vagy közvetlen módon behozhatjuk a négyessebességet.

Az első esetben a helyettesítést egy új eloszlásfüggvény bevezetésével hajtjuk végre. Bevezetjük a

$$\hat{f} = \hat{f}(q, t, v)$$

függvényt a régi

$$f = f(t, q_\lambda, v_\lambda \{p_\mu, q_\mu, t\})$$



helyére. Könnyű belátni, hogy a helyettesítés során

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial p_\lambda} &= \frac{\partial \hat{f}}{\partial v_\kappa} \frac{\partial v_\kappa}{\partial p_\lambda}, \\ \frac{\partial f}{\partial q_\lambda} &= \frac{\partial \hat{f}}{\partial v_\kappa} \frac{\partial v_\kappa}{\partial q_\lambda} + \frac{\partial \hat{f}}{\partial x_\lambda}, \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial \hat{f}}{\partial v_\kappa} \frac{\partial v_\kappa}{\partial t} + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t},\end{aligned}$$

ahol a  $\frac{\partial v_\kappa}{\partial p_\lambda}, \frac{\partial v_\kappa}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial v_\kappa}{\partial t}$  kifejezéseket a helyettesítés (15) képletéből kapjuk:

$$\begin{aligned}\frac{\partial v_\kappa}{\partial p_\lambda} &= (m_0 \gamma)^{-1} \left\{ \delta_{\kappa\lambda} - \frac{1}{c^2} v_\kappa v_\lambda \right\}, \\ \frac{\partial v_\kappa}{\partial q_\lambda} &= -(m_0 \gamma)^{-1} \left\{ \delta_{\kappa\lambda} - \frac{1}{c^2} v_\kappa v_\lambda \right\} \frac{e}{c} \frac{\partial A_\varrho}{\partial q_\lambda}, \\ \frac{\partial v_\kappa}{\partial t} &= -(m_0 \gamma)^{-1} \left\{ \delta_{\kappa\lambda} - \frac{1}{c^2} v_\kappa v_\lambda \right\} \frac{e}{c} \frac{\partial A_\varrho}{\partial t}.\end{aligned}$$

Ezek felhasználásával és a  $\hat{\phantom{x}}$ -jel elhagyásával végül a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) f + (m_0 \gamma)^{-1} \sum_{\varrho, \sigma=1}^3 F_\varrho \left\{ \delta_{\varrho\sigma} - \frac{1}{c^2} v_\varrho v_\sigma \right\} \frac{\partial f}{\partial v_\sigma} = 0 \quad (18)$$

egyenlethez jutunk, ahol

$$F_\varrho = -e \frac{\partial \Phi}{\partial q_\varrho} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_\varrho}{\partial t} + \frac{e}{c} (\mathbf{v} \times \text{rot } \mathfrak{A})_\varrho.$$

A (18) egyenletben a relativisztikus Boltzmann-egyenlet *Linhart* által javasolt alakjára ismerünk.

A második esetben a  $f = f(q_\lambda, t, p_\lambda \{w_\nu, q_\nu, t\})$  eloszlási függvény helyére az új  $\bar{f} = \bar{f}(q_\lambda, t, w_\lambda)$  eloszlási függvényt vezetjük be, s mint könnyen belátható, a differenciálhányadosokat a

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial p_\lambda} &= \frac{\partial \bar{f}}{\partial w_\kappa} \frac{\partial w_\kappa}{\partial p_\lambda}, \\ \frac{\partial f}{\partial q_\lambda} &= \frac{\partial \bar{f}}{\partial w_\kappa} \frac{\partial w_\kappa}{\partial q_\lambda} + \frac{\partial \bar{f}}{\partial q_\lambda}, \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial \bar{f}}{\partial w_\kappa} \frac{\partial w_\kappa}{\partial t} + \frac{\partial \bar{f}}{\partial t}\end{aligned}$$

képletek alapján írhatjuk át, ahol a (17)-ből kifolyólag

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial w_{\kappa}}{\partial p_{\lambda}} &= -(m_0 c)^{-1} \delta_{\kappa\lambda}, \\ \frac{\partial w_{\kappa}}{\partial q_{\lambda}} &= -(m_0 c)^{-1} \frac{e}{c} \frac{\partial A_{\kappa}}{\partial q_{\lambda}}, \\ \frac{\partial w_{\kappa}}{\partial t} &= -(m_0 c)^{-1} \frac{e}{c} \frac{\partial A_{\kappa}}{\partial t} \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

és

$$v_e = c(1 + w_{\sigma} w_{\sigma})^{-1/2} w_e. \quad (20)$$

Az átalakítások végrehajtása után a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c(1 + w_{\sigma} w_{\sigma})^{-1/2} w_e \frac{\partial \bar{f}}{\partial q_e} + (m_0 c)^{-1} F_{\lambda} \frac{\partial \bar{f}}{\partial w_{\lambda}} = 0 \quad (21)$$

egyenletet kapjuk, ahol

$$F_e = -e \frac{\partial \Phi}{\partial q_e} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_e}{\partial t} + \frac{e}{c} (1 + w_{\sigma} w_{\sigma})^{-1/2} (\mathbf{w} \times \text{rot } \mathfrak{A})_e. \quad (22)$$

A (21) egyenletben a relativisztikus Boltzmann-egyenletnek *Taub*, ill. *Clemmow* és *Willson* által javasolt alakjára ismerünk. Megjegyezzük, hogy a (21) egyenletet *Clemmow* és *Willson* eredetileg nem ezzel a módszerrel vezette le, hanem a helyvektor és a redukált sebességvektor segítségével kifeszített 6-dimenziós fázistérben ismételte meg a részecskeszám megmaradására vonatkozó gondolatmenetet. Az általuk nyert egyenletnek (21) tulajdonképpen csak speciális esete, mert a (21) egyenlet nem tartalmazza a  $(\mathbf{V}_w F) \bar{f}$  tagot. Ez a tag azonban az alkalmazások legtöbbszörénél, és különösen a Lorentz-erőnél nem ad járulékot.

Megjegyezzük még azt is, hogy a (21) egyenletet a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) f + (\mathfrak{F} \nabla_p) f = 0 \quad (23)$$

alakban is lehet írni, ahol  $f = f(q_{\lambda}, t, p_{\lambda})$ ;  $p_{\lambda}$  a relativisztikus impulzus:

$$\mathbf{p} = m_0 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2} \cdot \mathbf{v} = m_0 c \mathbf{w}.$$

Az ütközésmentesnek feltételezett rendszer esetében a (23) egyenlet pontosan meg egyezik a relativisztikus Boltzmann-egyenlet *Lichnerowicz* és *Marrot* által javasolt alakjával [4].

#### 4. A relativisztikus Boltzmann-egyenlet négydimenziós alakja

Most azt kívánjuk megvizsgálni, hogy a relativisztikus Boltzmann-egyenlet fentebb „klasszikus mechanikai” — vagyis háromdimenziós vektorokkal kifejezett — alakjából a négyesvektorokkal kifejezett szembeszökően relativisztikus alakhoz hogyan juthatunk el.



E cél érdekében határozzuk meg a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c(1+w^2)^{-1/2}(w\nabla)f + (m_0c)^{-1}(\mathfrak{F}\nabla_w)f = 0$$

egyenletet  $(1+w^2)^{+1/2}$ -nel és vegyük figyelembe, hogy a  $w$  redukált sebesség az  $u_s$  négyessebesség térbeli komponenseivel arányos.

$$u_s = \{cw, ic(1+w^2)^{1/2}\}.$$

Ily módon észrevevessük, hogy az egyenlet első két tagja az  $u_s\partial_s f$  kifejezésbe egyesíthető  $\left(\partial_s = \frac{\partial}{\partial x_s}, s=1, 2, 3, 4; x_4=ict\right)$ . Ami a harmadik tagot illeti, további átalakításra van szükség. A kérdéses szorzás után a harmadik tag

$$(m_0c)^{-1}(1+w^2)^{1/2}(\mathfrak{F}\nabla_w)f$$

vagy

$$(m_0c)^{-1}\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}(\mathfrak{F}\nabla_w)f$$

alakú. Itt az

$$\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}\mathfrak{F} = \mathfrak{K} = \{K_1, K_2, K_3\}$$

az erő négyesvektor térbeli része. Vizsgáljuk most a

$$\mathfrak{K}\frac{\partial f}{\partial w} = \mathfrak{K}\frac{\partial f(x_r, w)}{\partial w}$$

kifejezést. Vezessük be az  $f$  argumentumába a négyessebességet:

$$\mathfrak{K}\frac{\partial f(x_r, w)}{\partial w} = c\sum_{\sigma=1}^3\left[K_\sigma\frac{\partial f(x_r, u_s)}{\partial u_\sigma} + K_\sigma\frac{\partial f(x_r, u_s)}{\partial u_4}\frac{\partial u_4}{\partial u_\sigma}\right]$$

Mint hogy

$$u_s u_s = -c^2$$

következik, hogy

$$\frac{\partial u_4}{\partial u_\sigma} = -\frac{u_\sigma}{u_4}.$$

Másrészt feltételezzük, hogy

$$K_s u_s = 0, \quad (24)$$

vagyis:

$$K_4 = -\frac{1}{u_4}K_\sigma u_\sigma.$$

Ezeket figyelembe véve

$$\begin{aligned}\mathfrak{K}\frac{\partial f(x_r, w)}{\partial w} &= c\left(K_\sigma\frac{\partial f(x_r, u_s)}{\partial u_\sigma} - \frac{K_\tau u_\tau}{u_4}\frac{\partial f(x_r, u_s)}{\partial u_4}\right) = \\ &= c\left(K_\sigma\frac{\partial f}{\partial u_\sigma} + K_4\frac{\partial f}{\partial u_4}\right) = cK_s\frac{\partial f(x_r, u_\sigma)}{\partial u_s}.\end{aligned}$$

Ezzel az egyenlet valamennyi tagjának átalakítását végrehajtottuk és az

$$u_s \partial_s f(x_r, u_r) + (m_0)^{-1} K_s \frac{\partial f}{\partial u_s} = 0 \quad (25)$$

alakhoz jutottunk, amit eredetileg *Ken-iti Goto* javasolt [7].

Természetes, az a tény, hogy a (25) egyenletben az  $f(x_r, u_r)$  eloszlási függvényre a Lorentz-transzformációval szemben invariáns alakban megfogalmazott műveleteket írunk elő, nem mentesít bennünket attól, hogy az eloszlási függvény transzformációs sajátosságát meghatározzuk (ezt a 2. pontban elvégeztük).

Másrészt kiemljük, hogy a (25) egyenlet szembeszökően relativisztikus alakja érdekében a (24) egyenlettel egy külön feltevést tettünk, ami szerint a továbbiakban csak négyesteljesítménymentes erőkre szorítkozunk. Felmerül a kérdés, hogy ez a feltevés csak a véletlenül kiválasztott transzformáció velejárója és végső fokon elkerülhető, vagy pedig az egész eljárás alapjául szolgáló fogalmakkal kapcsolatos.

Ha a relativisztikus Hamilton-formalizmust vizsgáljuk, azonnal látható, hogy a módszer alkalmazásának mindaddig nincsen különösebb akadály, amíg a leírni kívánt rendszerben ható erők a nyugalmi tömeg változásához nem vezetnek (l. *Marx György* és *Szamosi Géza* [12], *G. Kálmán* [10], [11], *H. Rund* [13]). Így a (24) feltevés a Hamilton-formalizmus relativisztikus alkalmazhatósága feltételének, nem pedig véletlen bonyodalomnak tekintendő.

Ismételten említettük, hogy a plazma egyszerű modelljeiben, (pólus — töltések elektromágneses kölcsönhatása) a fenti megkötés nem jelent akadályt, mert triviálisan teljesül, ezért érdemes kitérni a relativisztikus Boltzmann-egyenletnek közvetlenül a relativisztikus Hamilton-függvényből való leszármaztatására is.

A speciális relativitáselméletben is a Liouville-tételből indulunk ki, csak most a fázisteret a részecskék világvektoraiból és impulzusnégyesvektoraiból építjük fel. Jelentse  $\varrho$  a pontsűrűséget a négyes téridő térszerű metszetein,  $\tau$  a sajátidőt. A Liouville-tétel

$$\frac{\partial \varrho}{\partial \tau} \equiv [\mathcal{H}, \varrho] = 0$$

alakban mondjuk ki (vö. *G. Kálmán* [11]), ahol a zárójel a Poisson-féle zárójeles kifejezést képviseli, négyesvektor helyzet- és impulzusváltozókkal. Alkalmazzuk most is a hármas-formalizmus során tett feltevéseinket, hanyagoljuk el a részecskék egymással való kölcsönhatását, s akkor az  $f=f(x_s, p_s)$  egyrészecske-eloszlás függvényekre a

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = [\mathcal{H}^1, f] = 0$$

egyenletet kapjuk, a  $\mathcal{H}^1$  egyrészecske-Hamilton-függvény segítségével. A kanonikus egyenletek

$$\dot{x}_s(\tau) = u_s(\tau) = \frac{\partial \mathcal{H}^1}{\partial p_s} \quad (26)$$

$$\dot{p}_s(\tau) = - \frac{\partial \mathcal{H}^1}{\partial x_s} \quad (27)$$



alakjának felhasználása után

$$u_s \frac{\partial f}{\partial x_s} + \dot{p}_s \frac{\partial f}{\partial p_s} = 0 \quad (28)$$

egyenlethez jutunk, ami a klasszikus formalizmushoz teljesen hasonlóan már majdnem a keresett Boltzmann-egyenlet, csak még a szokásokhoz híven az impulzusváltozóról a sebességváltozóra kell áttérni. A relativisztikus egyrészecske Hamilton-függvényt a

$$\mathcal{H}^1 = (2m_0)^{-1} \left[ p_r - \frac{e}{c} A_r \right] \left[ p_r - \frac{e}{c} A_r \right]$$

alakban vesszük fel. A (26) kanonikus egyenlet a

$$m_0 u_r = p_r - \frac{e}{c} A_r \quad (29)$$

helyettesítési képlethez vezet, amellyel a  $p_r$  impulzusról az  $u_r$  sebességre térhetünk át. Ekkor azonban be kell vezetnünk az  $f = f(x_r, p_r(u_s, x_s))$  régi eloszlási függvény helyett az  $\bar{f} = \bar{f}(x_r, u_r)$  új függvényt. Nyilvánvaló, hogy a szereplő differenciálhányadosokat a

$$\frac{\partial f}{\partial x_r} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_r} + \frac{\partial \bar{f}}{\partial u_s} \frac{\partial u_s}{\partial x_r}, \quad (30)$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_r} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial u_s} \frac{\partial u_s}{\partial p_r} \quad (31)$$

összefüggések és a (29)-ből nyerhető

$$\frac{\partial u_s}{\partial x_r} = -m_0^{-1} \frac{e}{c} \frac{\partial A_s}{\partial x_r},$$

$$\frac{\partial u_s}{\partial p_r} = m_0 \delta_{sr}$$

alapján számíthatjuk ki. Minthogy

$$\frac{\partial f}{\partial x_r} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_r} - \frac{em_0}{c} \frac{\partial \bar{f}}{\partial u_s} \frac{\partial A_s}{\partial x_r},$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_r} = m_0 \frac{\partial \bar{f}}{\partial u_r},$$

a (28) egyenlet az

$$u_s \left[ \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_s} - m_0 \frac{e}{c} \frac{\partial \bar{f}}{\partial u_s} \frac{\partial A_s}{\partial x_r} \right] + m_0^{-1} \dot{p}_s \frac{\partial \bar{f}}{\partial u_s} = 0 \quad (32)$$

alakot ölti. Figyelembe véve, hogy (27) szerint

$$\vec{p}_s = m_0^{-1} \frac{e}{c} u_r \frac{\partial A_r}{\partial x_s},$$

átrendezés után az

$$u_s \frac{\partial \vec{f}}{\partial x_s} + m_0 \frac{e}{c} u_r F_{rs} \frac{\partial f}{\partial u_s} = 0 \quad (33)$$

alakra jutunk, ahol

$$F_{rs} = \frac{\partial A_s}{\partial x_r} - \frac{\partial A_r}{\partial x_s}$$

a térerősségtenzor. A relativisztikus Boltzmann-egyenletnek ez az alakja szerepel *Beljajev* és *Budker* [14], illetve *Mojszejev* és *Zaslavszkij* munkáiban [15], [16], [17], [18] is. Természetesen a (32) egyenletben szükség esetén szerepelhet más, nem elektromágneses eredetű külső erőteréből származó ponderomotoros erő is, feltéve, hogy a Hamilton-formalizmussal való tárgyalás elé elvi akadály nem gördül.

\*

A szerző hálás köszönetét fejezi ki ezúton is *T. Kahan* professzornak hasznos tanácsaiért.

## IRODALOM

- [1] *I. B. Bernstein*, Phys. Rev. 109, 10, 1958.
- [2] *P. G. Bergman*, „The Special Theory of Relativity”, *Handbuch der Physik* (Szerk.: S. Flügge). Bd. 4. § 29. Springer Verlag, 1962.
- [3] *J. E. Krizan—P. Havas*, Phys. Rev. 128, 2916, 1962.
- [4] *A. Lichnerowicz—R. Marrot*, Comptes Rendus (Paris), 210, 759, 1940.
- [5] *A. H. Taub*, Phys. Rev. 74, 328, 1948.
- [6] *P. C. Clemmow—A. J. Willson*, Proc. Cambr. Phil. Soc. 53, 222, 1957.
- [7] *Ken-iti-Goto*, Progr. Theor. Phys. 20, 1, 1958.
- [8] *J. G. Linhart*, *Plasma Physics*, North Holland Publ. Co. Amsterdam 1960. p. 61.
- [9] *J. L. Synge: The Relativistic Gas* North Holland Publ. Co. Amsterdam, 1957.
- [10] *G. Kálmán*, Phys. Rev. 123, 384, 1961.
- [11] *G. Kálmán*, Nuovo Cim. 23, 908, 1962.
- [12] *G. Marx—G. Szamosi*, Acta Phys. 4, 219, 1954.
- [13] *H. Rund*, Nuovo Cim. 23, 227, 1962.
- [14] *S. T. Beljajev—G. I. Budker*, Доклады АН СССР 107, 807, 1956.
- [15] *S. S. Mojszejev*, ЖЭТФ, 37, 553, 1959.
- [16] *G. M. Zaslavszkij—S. S. Mojszejev*, ЖЭТФ, 1054, 1962.
- [17] *G. M. Zaslavszkij—S. S. Mojszejev*, ЖЭТФ, 33, 782, 1963.
- [18] *G. M. Zaslavszkij*, ЖЭТФ, 33, 801, 1963.



# KÖNYVISMERTETÉS

Wagner—Mellgren—Westbrook: *Thermodynamics of Alloys*

Az ötkötetes Handbuch der Metallphysik első kötetének 1940-ben kiadott második részében jelent meg K. Wagnertől a Többkomponens fémrendszer termodinamikája. A Wagner által írt fejezet kibővítve és némileg kijavítva 1952-ben önálló kötetként jelent meg S. Mellgren és I. H. Westbrook fordításában angolul *Thermodynamics of Alloys* címmel az Addison—Wesley kiadó gondozásában. A fordítás számos új adatot, új gondolatot és a fémek rendszerek szempontjából speciálisan fontos számítási módszereket tartalmazott. Értékét mutatja, hogy tíz évre rá, 1962-ben változatlan újranyomására került sor. — A tárgyalásban a hangsúly az elveken van, de ezek alkalmazását számos speciális rendszeren bemutatja. Az így megvizsgált ötvözetek legfontosabb adatait táblázatokban közli. Az olvasó a könyvben az ötvözetindex és a 419 utalást tartalmazó bibliográfia segítségével a számára értékes adatokat könnyen megtalálhatja. (T. Gy.)

Tarján Imre: *Fizika orvosok és biológusok számára*  
című könyvéről

A könyv az orvostanhallgatók számára egyetemi tankönyv. Emellett természetesen mint csaknem minden magyarnyelvű tankönyvnek feladata, hogy kielégítse a már végzetek szakmai igényeit is és ezért a szerző — mint előszavában is írta — igyekezett az anyagot úgy összeállítani, hogy tanulmányait végző orvos és napi munkáját végző orvos egyaránt megtalálja a számára szükséges és érdekes fizikai ismereteket.

Ennek megfelelően a könyv szisztematikusan vezet végig bennünket a fizika főbb fejezetein, kiemelve azokat a részeket, amelyek, mint már említettük, a praxisban működő orvosok és tanulmányaikat végző orvostanhallgatók számára a legszükségesebb alapismereteket tartalmazzák.

A könyv célkitűzéseiben felveszi, hogy a teljességre törekvés nélkül az érettségi szintjén kevés áttekintéssel nyújtott, általános fizikai ismereteken túlmenő összefoglalást adjon; kiegészítse és elmélyítse azokat a legfontosabb törvényeket, mérés technikai alapelveket, amelyek a modern kísérleti biológiában és az orvostudományban alapvetőek. A könyv önmagában egészet kíván nyújtani, terjedelme alapján mégis válogatni kényszerül.

A könyv felépítésében fokozatosan vezeti be a fizika fogalmi rendszerét és a szorosan egymásraépülő fizikai fogalmak rendszerében természetesen hézagot nem hagyhatott. A 485 oldalas könyv beosztása követi a klasszikus könyvek sorrendjét, főbb fejezeteinek terjedelme:

Mechanika, Rezgések és hullámok, Hangtan, Hőtan kb. 180 oldal, Elektromosságtan, Fénytan, Röntgensugárzás mintegy 150 oldal, Atomfizika, Atommagfizika kb. 120 oldal. Táblázatok, Matematikai függelék, Tárgymutató közel 30 oldalt tesznek ki.

A felvett ismeretanyag megválasztása egy ilyen válogatási elvekkel felépült könyvnél első szempont. Helyesen járt el a szerző, amikor ezt a sokszempontú válogatási lehetőséget úgy oldotta meg, hogy a klasszikus fizika (mechanika, rezgés tan, optika stb.) fejezetekben az alapvető fizikai ismeretek összefoglalása mellett kiemeli az orvosok számára érdekes alkalmazásokat (lencsék, mikroszkóp stb.).

A teljességre törekvés helyettesítésére végigvonul a könyvön egy összefoglaló váz és az érdekes alkalmazások bővebb tárgyalása mellett sem válik szétesővé.

A fizika modern fejezetei — éppen az alkalmazások miatt — nagyobb teret kaptak. Pl. a RTG és részecskesugárzás terjedelmes fejezetei a legkorszerűbb irányú alapismeretekben biztos tájékozódást nyújtanak.

Figyelemmel a változakra, a szerző az anyag kiválogatást, az egyik legnagyobb problémát jelentő feladatot, szerencsésen oldotta meg és fentiek alapján a helyes arányokat találta el.

Az egyes részek tárgyalására fordított terjedelem és a beosztás a részek fontosságának megfelelő, egyensúlyban van a tárgykörök szerepével a fizika egészében, ill. a gyakorlati alkalmazásokban.

A feldolgozás módja jó. A feltételezett előismeret a középiskola anyaga, erre azonban nemcsak épít, hanem el is mélyíti. Véleményem szerint ez a kettősség a mostani középiskolai fizikai előkészítés mellett szükséges. A középiskolában a fizika kezdő részénél az életkori érettség

még nem elegendő egy elmélyült, precíz fogalomalkotásra, ezt pótolja a szerző a kellő gondossággal és fokozatossággal felépített fizikai fogalmakkal. A könyv tartalmazza ilyenfokú részletességgel a legfontosabb fizikai fogalmak és mennyiségek definícióját, s ezek világos tisztázása után tér rá az alkalmazások területére.

Az alkalmazások tárgyalása igen sok szempontú lehet. A szerző — véleményem szerint — helyesen törekedett arra, hogy az alkalmazások keretében ne csak az alkalmazott fizikai elvekre, hanem az orvosi v. biológiai területen elért eredményekre is kitérjen. Megítélésem szerint az igen sok helyen nagyon jól érzékeltetett eredmények helyenként közérthetőbb fogalmazásával a szakmában járatosak számára is érdekesen és vonzóan tünteti fel a fizikai módszereket, megmutatva, hogy ezek a módszerek az orvosok és biológusok tudományos eredményeiben mit nyújtottak, ill. mit nyújthatnak.

Az ismeretanyag csoportosítása áttekinthető fejezetekre, jól tagolt bekezdésekre és világos vázra épült. A szerző él azzal a lehetőséggel, hogy a kevésbé fontosnak ítélt, s esetleg a gondolatmenetet megtörő magyarázatokat petit betűs szedésbe tegye és ezzel elősegítse azt, hogy könyve egyetemi tankönyvként jól tanulhatóvá váljék. Ugyanezt szerencsésen segítik a kurziválással kiemelt definíciók, fejezetek, alfejezetek megfelelő tagozódásai.

Az összbenyomás, melyet a könyvet olvasó, illetve tanuló nyer, igen jó. Érdekes és vonzó színben tünteti fel a könyv a tárgyalt anyagot. A könyv alaphangja bizonyítja a felölelt ismeretek szükségességét. A könyv ábrái szépek, tipográfiája ízléses, papírja jó minőségű.

A bíráló feladata volna a könyv számos érdemén túl, természetesen a kevésszámú hiba felsorolása is. A közel 500 oldalas könyben kirívó szakmai, vagy pedagógiai hiba nincs. Amint azt részletesen taglaltam, mindazok az erények, amelyek egy jó utánképző és tankönyv jellegű összefoglalástól megkövetelendők, a könyvben megtalálhatók. A kisebb ízlésbeli különbségek, amelyek többségükben árnyalati pedagógiai előnyöket jelentenek; a kisebb, jórészt stíláriis jellegű módosításokra tehető javaslatok, amelyek hol a precizitás növelésére, hol szebb, magyarosabb kifejezésekre hívnák fel a figyelmet, nem szükséges, hogy ismertetésünkben szerepeljenek. (P. J.)

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Dálok János

A kézirat beérkezett: 1965. IV. 6. — Példányszám: 650 — Terjedelem: 5,6 (A5) ív, 26 ábra

Szegedi Nyomda Vállalat 65-5700



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.591

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Lovas István:</i> Rugalmas neutron-szóródás a $C^{12}$ atommagon .....	319
<i>Máthé György:</i> Kísérleti tapasztalatok egy lassú-gyors rendszerű $10^{-8}$ sec tartományban működő koincidencia körrel kapcsolatban .....	337
<i>Berencz Ferenc:</i> A $H_2$ molekula $1\text{sns}^1S$ állapotainak molekulapálya-módszeres számításai II.	353
<i>Szabó Piroska:</i> Belső súrlódási együttható meghatározása csúszó síklapos viszkoziméterrel	361
<i>Abonyi Iván:</i> A relativisztikus Boltzmann-egyenletről I. ....	367



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XIII. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1965

A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181) útján eszközölhetők.



# A DISZLOKÁCIÓK KONTINUUMELMÉLETE II.

## A RUGALMAS KONTINUUM ALAPEGYENLETEI\*

CHATEL PÉTER és KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Kísérleti Fizikai Tanszék

### 1. Bevezetés

Jelen cikksorozat első dolgozatában [1] szemléletesen leírtuk a különböző diszlokáció-típusokat. Mivel célunk az volt, hogy minél áttekinthetőbb képet adjunk a diszlokációk környezetében uralkodó viszonyokról, elsősorban az atomok elrendeződésével jellemeztük a diszlokációkat (2. §). Ugyanakkor megadtuk a diszlokációk általános definícióját (4. §), amelyről megmutattuk, hogy rugalmas kontinuumra is alkalmazható. A továbbiakban az első részben ismertetett általános fogalmak felhasználásával megvizsgáljuk, hogy milyen kvantitatív összefüggések nyerhetők a diszlokációk elméletében a klasszikus rugalmasságtan segítségével. Vizsgálataink során ki fog tűnni az is, hogy mi a klasszikus rugalmasságtan alkalmazhatóságának határa, és milyen továbbfejlesztésre van szükség, ha ezen a határon túl akarunk lépni.

E második részben a klasszikus rugalmasságtan formalizmusát kívánjuk röviden ismertetni elsősorban azzal a céllal, hogy a későbbiek során az alkalmazások és általánosítások egységes felfogásban és jelölésmódban kerülhessenek tárgyalásra. Ennek megfelelően e dolgozat néhány, tankönyvekben is megtalálható, tételt és levezetést is tartalmaz kissé speciális megfogalmazásban és mindig a diszlokációk elméletében lényeges szempontok kiemelésével.

A klasszikus rugalmasságtan legeredetibb formájában azon jelenségekkel foglalkozik, amelyek rugalmas testekben külső erők hatására lépnek fel. Egyik alapvető tétele, az ún. Kirchoff-féle egyértelműségi tétel [2] szerint egy egyszeresen összefüggő testre ható külső erők egyértelműen meghatározzák a testben fellépő feszültségeket. Ez a tétel csak akkor érvényes, ha a rugalmas deformációk a test minden pontjában kielégítik az ún. St. Venant-féle kompatibilitási feltételt [2]. Mármint ha az anyagban diszlokációk keletkeznek, a testben uralkodó feszültségek nyilván a külső erők változatlansága mellett is megváltoznak, vagyis az egyértelműségi feltétel érvényét veszti. Ennek az az oka, hogy a diszlokációk környezetében a deformációk nem elégítik ki a St. Venant-féle kompatibilitási feltételt, ezért a diszlokációk feszültségforrásként lépnek fel az anyagban. Az általuk előidézett feszültségeket belső feszültségeknek, vagy sajátfeszültségeknek nevezzük. Az inkompatibilitási feltétel megsértése miatt e feszültségek számítására a klasszikus rugalmasságtan eredeti formájában nem alkalmas.

Két út kínálkozik ezekután a belső feszültségek meghatározására. Az egyik a klasszikus elmélet alkalmazása a diszlokációk közvetlen környezetének kirekesztésével; erre már utaltunk az előző dolgozat 4. §-ában, és ezt kívánjuk bemutatni sorozatunk III. és IV. részében. A másik a rugalmas kontinuumok elméletének továbbfejlesztése; ez további dolgozataink tárgyát képezi.

\* Érkezett 1964. dec. 25.



A kontinuumelmélet alkalmazhatósági korlátjának tűnik az a körülmény, hogy a reális anyagok rugalmas viselkedése lényegesen kisebb feszültségeknél megszűnik, mint azt elméletileg várnánk (ld. I. 3. §). A vártnál kisebb feszültségekre fellépő képlékeny alakváltozás vagy törés viszont éppen a diszlokációk jelenlétének és mozgásának következménye, ezek a hibák pedig tökéletes rácsba vannak beágyazva, vagyis olyan anyagba, amely az elméleti folyáshatárig valóban rugalmasan viselkedik. Ha tehát lemondunk a diszlokációk centrumának vizsgálatáról, várható, hogy a klasszikus rugalmasságtan helyes eredményre vezet.

A diszlokációk centrumában uralkodó viszonyokról már természetesen csak az atomi elrendeződés ismeretében kaphatunk képet. Az ilyen modell természeténél fogva speciális: csak adott kristályszerkezetre és a kötőerők adott típusára (ionos, fémcs, stb.) vonatkozhat. A kontinuumelmélet ezzel szemben rendelkezik azzal az előnnyel, hogy az anyag minősége csakis a rugalmas állandók révén jut kifejezésre, és így eredményei alkalmazhatók különböző kémiai és krisztallográfiai tulajdonságú anyagokra.

## 2. A rugalmas deformációk geometriai jellemzése

### 2.1. Jelölések

A rugalmas kontinuum geometriai és mechanikai leírása vektor- és tenzor-terek segítségével történik. Mivel a vektor- és tenzoregyenletek írásmódja igen változatos, célszerűnek mutatkozik lerögzíteni a jelölésmódot. A továbbiak során az irodalomban legelterjedtebb indexes írásmódot alkalmazzuk, ami számítások elvégzésénél feltétlenül előnyös. Ha valamely végeredmény szemléletes értelmezéséhez célszerűnek látszik, át fogunk térni az indexek nélküli írásmódra, melyben a vektor mennyiségeket nyíllal felülhúzva ( $\vec{v}$ ), a tenzorokat pedig egyszerűen aláhúzva, általában görög betűkkel jelöljük.

Az indexes írásmódban a relativitáselméletben szokásos összegezési konvención kívül bevezetjük a parciális deriváltak jelölésére a következő jelölést: Valamely mennyiségnek a  $k$ -adik koordináta szerinti deriváltját úgy jelöljük, hogy a többi indexeitől vesszővel elválasztva kiírjuk a  $k$  indexet:

$$(\text{grad } F)_i = \frac{\partial F}{\partial x_i} = F_{,i};$$

$$(\text{Grad } \vec{u})_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = u_{j,i};$$

$$\text{div } \vec{u} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = u_{i,i};$$

$$(\text{Div } \alpha)_i = \frac{\partial \alpha_{ki}}{\partial x_k} = \alpha_{ki,k}.$$

Ha kérdéses mennyiség már eleve derivált, a deriválást jelző indexektől nem választjuk el  $k$ -t újabb vesszővel, vagyis a vesszőtől jobbra álló indexek mind a meg-



felelő koordináták szerinti, a vesszőtől számított sorrendben történő deriválást jelentik:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_k} = F_{,ik}; \quad \Delta F = F_{,kk}.$$

A vektorszorzat és a rotáció leírásához az ún. permutációs tenzort alkalmazzuk.

Ennek definíciója a következő:

$$\varepsilon_{ikl} = \begin{cases} 0 & \text{ha } i, k, l \text{ közül legalább kettő megegyezik,} \\ +1 & \text{ha } i, k, l \text{ 1, 2, 3-nak páros permutációja és} \\ -1 & \text{ha } i, k, l \text{ 1, 2, 3-nak páratlan permutációja.} \end{cases}$$

Könnyen realizálhatók a következő azonosságok:

$$\begin{aligned} (\vec{a} \times \vec{b})_i &= \varepsilon_{ikl} a_k b_l; & (\text{rot } \vec{b})_i &= \varepsilon_{ikl} b_{l,k}; \\ (\vec{a} \times \underline{\alpha})_{ij} &= \varepsilon_{ikl} a_k \alpha_{lj}; & (\text{Rot } \underline{\alpha})_{ij} &= \varepsilon_{ikl} \alpha_{lj,k}; \\ (\underline{\alpha} \times \vec{a})_{ij} &= \varepsilon_{ikl} \alpha_l a_{kj}. \end{aligned}$$

Itt bizonyítunk be a permutációs tenzorral kapcsolatos két egyszerű tételt, amelyeket a levezetéseink során gyakran fogunk alkalmazni.

(1) Két permutációs tenzor szorzata kifejezhető Kronecker-delták segítségével a következőképpen:

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmk} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}. \quad (1)$$

Az állítás könnyen belátható:  $k$  adott értéke mellett  $i, j$ -nek és  $l, m$ -nek különbözőknek kell lennie  $k$ -tól (és páronként egymástól), egyébként valamelyik  $\varepsilon$  értéke zérus lenne. Ez kétféleképpen valósulhat meg: vagy a két  $\varepsilon$  indexei rendre megegyeznek, ekkor a szorzat értéke  $+1$ , vagy pedig csak az első két index sorrendje különböző, ekkor a két tényező ellenkező előjelű, vagyis szorzatuk  $-1$ . Az egyenlet jobb oldala éppen ezt a két lehetőséget tükrözi a megfelelő előjelekkel. Ha a permutációs tenzorok olyan szorzatára van szükségünk, amelyben az összegező indexek más helyeken állnak, azt (1)-ből a permutációs tenzor tulajdonságainak ismeretében az indexek felcserélésével elő tudjuk állítani. Az eredmény nyilván csak előjelben fog különbözni a fentitől.

(2) A

$$v_i = \varepsilon_{ikl} \alpha_{kl} \quad (2)$$

vektor akkor és csak akkor tűnik el, ha  $\alpha_{kl} = \alpha_{lk}$ , vagyis ha az  $\alpha$  tenzor szimmetrikus. A bizonyításhoz (2) azonos átalakításával jutunk:

$$v_i = \frac{1}{2} (\varepsilon_{ikl} \alpha_{kl} + \varepsilon_{ilk} \alpha_{lk}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} (\alpha_{kl} - \alpha_{lk})$$

Az átalakítások nyilván mindkét irányban elvégezhetők, mert hiszen csak összegező indexek átjelölése és a permutációs tenzor indexeinek felcserélése történt. Az utolsó tag pedig látható módon akkor és csak akkor tűnik el, ha  $\underline{\alpha}$  szimmetrikus, amint azt állítottuk. A tétel természetesen nemcsak akkor igaz, ha  $\underline{\varepsilon}$  összegező indexei a második és a harmadik helyen állnak, hiszen azok felcserélése csak előjelváltást okoz.

## 2.2. A deformációs tenzor

A rugalmas testek deformációjának geometriai leírása a test két állapotának, a deformáció előtti és a deformált állapotnak az összehasonlításán alapul. A két állapot közt, a deformáció során, a test pontjai elmozdulást szenvednek. Ha ezek az elmozdulások olyanok, hogy változatlanul hagyják bármely két anyagi pont egymástól mért távolságát, az anyag állapotában nem történt változás, hiszen ilyen elmozdulásra merev testek is képesek. Ha az elmozdulások megváltoztatják valamely két pont távolságát, a második állapot valóban deformált állapot lesz. A deformált állapotot teljes mértékben ismerjük, vagyis bármely két pont távolságának megváltozását is meg tudjuk határozni, ha ismerjük a test minden egyes anyagi pontjának elmozdulását.

Legyenek a  $P$  és  $P'$  pontok koordinátái a deformálatlan állapotban  $x_i$  és  $x_i + dx_i$ , elmozdulásvektoraik komponensei pedig  $u_i$  és  $u_i + du_i$ . Adjuk meg az elmozdulásvektort, mint a deformáció előtti koordináták függvényét, és számítsuk ki, mennyivel változik meg a  $P$  és  $P'$  pontok távolságának négyzete.

A deformáció előtt

$$ds^2 = dx_i \cdot dx_i$$

a deformáció után pedig

$$\begin{aligned} ds'^2 &= (dx_i + du_i) \cdot (dx_i + du_i) = \\ &= (dx_i + u_{i,k} dx_k) \cdot (dx_i + u_{i,l} dx_l) = \\ &= dx_i dx_i + 2u_{i,k} dx_i dx_k + u_{i,k} u_{i,l} dx_k dx_l. \end{aligned}$$

A távolságnégyzet megváltozása:

$$ds'^2 - ds^2 = (u_{i,k} + u_{k,i} + u_{j,k} u_{j,i}) dx_k dx_i$$

Itt az összegező indexek alkalmas átjelölésével kiemeltük  $dx_k dx_i$ -t, és az előtte álló másodrendű tenzort szimmetrikussá tettük. Ennek a tenzornak az  $1/2$ -szeresét nevezzük dilatációs tenzornak, segítségével a távolságnégyzet egyszerűen kifejezhető:

$$ds'^2 - ds^2 = 2\bar{\varepsilon}_{ik} dx_i dx_k \quad (3)$$

ahol

$$\bar{\varepsilon}_{ik} = \frac{1}{2} (u_{i,k} + u_{k,i} + u_{j,k} u_{j,i}).$$

A (3) kifejezés nem tartalmaz semmiféle közelítést, tehát tetszés szerinti nagy deformációkra is igaz. Ha feltételezzük, hogy a szóban forgó deformációk kicsik, vagyis az  $u_{j,k}$  deriváltakban másodrendű tagok elhanyagolhatóak, a következő egyszerűbb kifejezés adódik:

$$ds'^2 - ds^2 = (u_{i,k} + u_{k,i}) dx_i dx_k = 2\varepsilon_{ik} dx_i dx_k.$$

Az itt definiált

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} (u_{i,k} + u_{k,i}) \quad (4)$$

tenzort nevezzük deformációs tenzornak, ezt fogjuk a továbbiakban a deformált állapot leírására használni.

Az  $u_{j,i} u_{j,k}$  tag elhanyagolása a klasszikus rugalmasságtanban, ahol a feszültségek és a deformációk közt lineáris kapcsolatot (Hooke-törvény) tételezünk fel,



biztosan indokolt. Megmutatható ugyanis, hogy a reális anyagokra a Hooke-törvény alkalmazása lényegesen kisebb deformációknál okoz hibát, mint a fenti elhanyagolás. Ebből az következik, hogy amíg a Hooke-törvényt elfogadjuk, csak felesleges matematikai nehézségeket idéznénk elő az  $u_{j,k}u_{j,i}$  összeg figyelembevételével, mert a dilatációs tenzorral felépített lineáris elmélet nem ad jobb közelítést, mint a deformációs tenzorral felépített nem lineáris elmélet.

### 2.3. A kompatibilitási feltétel

A deformációs tenzor bevezetésekor kiemeltük, hogy a deformált állapot leírásához elegendő az elmozdulás vektor terének ismerete. Ez három független komponens-függvényt, három funkcionális szabadsági fokot [3] jelent, míg a belőle származtatott szimmetrikus deformációs tenzor funkcionális szabadsági fokainak száma hat. Tehát ha a deformáció megadható egyértékű elmozdulástérrel, akkor az alakváltozást leíró deformációs tenzor komponensei közt valamilyen összefüggésnek kell fennállnia. Ha a deformációs tenzort az elmozdulástér helyett akarjuk alkalmazni, ismernünk kell ezt az összefüggést.

Meghatározzuk annak szükséges és elégséges feltételét, hogy az  $\alpha$  tenzortér vektortérből legyen származtatható. A szükséges feltételhez a vektortér tulajdonságaiból kiindulva, az elégséges feltételhez pedig a fordított úton, a tenzor komponensektől megkövetelendő tulajdonságokból kiindulva jutunk el.

Vizsgáljuk meg először az elmozdulástér tulajdonságaiból levezethető szükséges feltételt. A legáltalánosabb deformációk esetén az elmozdulástér nem rotációmentes,

$$\vec{\omega} = \text{rot } \vec{u} \neq 0. \quad (5)$$

Ahhoz, hogy  $\vec{u}$  a deformált állapot egyértelmű leírását adja, meg kell követelni, hogy az  $\vec{\omega} = \text{rot } \vec{u}$  vektortér egyértékű legyen, vagyis hogy a

$$\oint_G d\vec{\omega} = 0 \quad (6)$$

egyenlőség bármely zárt  $G$  görbe mentén teljesüljön. Figyelembe véve, hogy  $\omega_i = \varepsilon_{ikl}u_{l,k}d\omega_i$  a következőképpen alakítható át:

$$d\omega_i = \varepsilon_{ikl}u_{l,kj}dx_j = \varepsilon_{ikl}(u_{l,j} + u_{j,l}),_k = 2\varepsilon_{ikl}e_{lj,k}dx_j = (\text{Rot } \underline{\varepsilon} d\vec{r})_i.$$

Itt kihasználtuk, hogy a Young-tétel az  $u_i$  komponensekre fennáll, és ezért az  $\varepsilon_{ikl}u_{j,lk}$  összeg a 2.1. § (2) tétele értelmében zérus. Az  $u$  vektortérre tett megkötésünk tehát  $\underline{\varepsilon}$ -ra a

$$\oint_G \text{Rot } \underline{\varepsilon} d\vec{r} = 0$$

egyenlőség teljesülését írja elő. Mint ismeretes, ez akkor és csak akkor következik be bármely zárt görbe mentén, ha az integrandus rotációja zérus, vagyis

$$\text{Rot Rot } \underline{\varepsilon} = 0. \quad (7)$$

Ez az  $\underline{\varepsilon}$  tenzortérnek vektortérből való származtathatóságának szükséges feltétele, az ún. St. Venant-féle kompatibilitási feltétel. Megmutatjuk, hogy ez a feltétel egyúttal elégséges feltétel is.

Fejezzük ki  $u_{i,k}$ -t  $\underline{\varepsilon}$  és  $\vec{\omega}$  segítségével:

$$u_{i,k} = \varepsilon_{ik} - \frac{1}{2}\varepsilon_{jik}\omega_j. \quad (8)$$

Ez az egyenletrendszer csak akkor nem önmagának ellentmondó (akkor kompatibilis), ha az általa megadott  $u_i$  komponensekre teljesül a Young-tétel:

$$u_{i,kl} = u_{i,lk},$$

vagyis

$$\varepsilon_{ik,l} - \frac{1}{2}\varepsilon_{jik}\omega_{j,l} = \varepsilon_{il,k} - \frac{1}{2}\varepsilon_{jil}\omega_{j,k}.$$

Innen  $\omega_{j,k}$  kifejezhető  $\underline{\varepsilon}$  deriváltjaival és a következő alakba írható:

$$\varepsilon_{jis}\omega_{j,r}(\delta_{ks}\delta_{lr} - \delta_{ls}\delta_{kr}) = 2\varepsilon_{im,n}(\delta_{mk}\delta_{nl} - \delta_{lm}\delta_{kn}).$$

Mindkét oldalon a Kronecker-delták helyébe az (1) egyenlet szerint permutációs tenzorokat hozhatunk be:

$$\varepsilon_{jis}\varepsilon_{psr}\varepsilon_{pkl}\omega_{j,r} = 2\varepsilon_{im,n}\varepsilon_{jkl}\varepsilon_{jmn}.$$

Alkalmazzuk most a bal oldal első két permutációs tenzorára az (1) egyenletet, és hajtuk végre a Kronecker-delták által előírt indexcseréket:

$$(\delta_{jr}\delta_{ip} - \delta_{pj}\delta_{ri})\varepsilon_{pkl}\omega_{j,r} = 2\varepsilon_{jkl}\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{im,n};$$

$$\varepsilon_{ikl}\omega_{s,s} - \varepsilon_{jkl}\omega_{j,i} = 2\varepsilon_{jkl}\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{im,n}.$$

Beszorozva mindkét oldalt  $\delta_{ik}$ -val kapjuk  $\omega_{j,k}$  kívánt előállítását:

$$\omega_{j,k} = -2\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{km,n}. \quad (9)$$

A (8) és (9) egyenletek segítségével  $\underline{\varepsilon}$  ismeretében rekonstruálni tudjuk az elmozdulásteret, amelyből azt származtattuk. Ezen egyenletek megoldhatóságának elégséges feltétele tehát elégséges lesz ahhoz is, hogy  $\underline{\varepsilon}$  vektortérből legyen származtatható, hiszen teljesülésekor a kérdéses vektorteret elő tudjuk állítani. A megoldhatósághoz ismét a keresztbe vett parciális deriváltak egyenlőségét kell megkövetelnünk:

$$\omega_{j,kl} = \omega_{j,lk}.$$

(9)-et felhasználva és zérusra redukálva:

$$\varepsilon_{jmn}(\varepsilon_{km,nl} - \varepsilon_{lm,nk}) = 0.$$

Ezt ismét Kronecker-delták segítségével írjuk fel, és azokat az (1) azonosság alapján permutációs tenzorokkal fejezzük ki:

$$\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{rm,ns}(\delta_{rk}\delta_{ls} - \delta_{jl}\delta_{ks}) = 0,$$

$$\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{prs}\varepsilon_{pkl}\varepsilon_{rm,ns} = 0.$$

Mivel a  $k$  és  $l$  karakterisztikus indexek,  $p$  nem valódi összegező index, hiszen  $k$  és  $l$  lerögzítése után  $\varepsilon_{pkl}$  egyetlen  $p$  értékre különbözik zérustól. Ezért  $\varepsilon_{pkl}$ -t elhagyhatjuk, mert az csak  $+1$ -gyel és  $-1$ -gyel való szorzást jelent. Ezekután a következő elégséges feltételt kapjuk:

$$\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{prs}\varepsilon_{rm,ns} = -(\text{Rot Rot } \underline{\varepsilon})_{pj} = 0.$$

Ez valóban azonos a (7) szükséges feltétellel.



Az itt tárgyalt probléma hasonló az elektrosztatikai potenciál létezésének problémájához, csak az itt szereplő mennyiségek mindig eggyel magasabb rendűek. Az elektrosztatikában annak feltételét keressük, hogy az  $\vec{E}$  vektortér előállítható legyen valamilyen  $V$  skalártér gradienseként. Ennek szükséges és elégséges feltétele a  $\text{rot } \vec{E} = 0$  egyenlet teljesülése, ami a Young-tétel érvényességét írja elő  $V$  másodrendű parciális deriváltjaira. Hasonlóan láthattuk, hogy a  $\text{Rot Rot } \underline{\varepsilon} = 0$  összefüggés, amely az  $\underline{\varepsilon}$  tenzortér vektortérből való származtathatóságának szükséges és elégséges feltételének bizonyult,  $\vec{u}$  deriváltjaira a Young-tétel teljesülését írja elő. Mint látni fogjuk, ez az analógia tovább vihető; miként az elektrodinamikában az általános esetben nem elegendő a skalárpotenciál megadása, éppúgy a diszlokációkkal kapcsolatos általánosabb természetű deformációk fellépésekor nem teljesül az inkompatibilitási feltétel, és így  $\underline{\varepsilon}$  nem vezethető vissza egyértékű  $\vec{u}$  vektortérre.

### 3. A rugalmas deformációk mechanikai jellemzése

#### 3.1. Feszültségtenzor, egyensúlyi feltételek

Az eddigiekben megadtuk a deformált kontinuumok geometriai leírását. A deformáció mechanikai leírásához, és az ehhez szükséges feszültségtenzorhoz a kontinuum egy kiszemelt térfogatelemére ható erők vizsgálata útján jutunk el.

Tekintsük a kontinuum egy  $dV$  térfogatelemét, és vegyük sorra, milyen erők hatnak rá. Egyrésztől fellépnek az ún. térfogati erők, amelyek arányosak a vizsgált térfogatelem nagyságával. Az

$$F_i = \int_V f_i dV \quad (10)$$

összefüggés segítségével definiálható az  $f_i$  térfogati erőssűrűség. A deformációval kapcsolatosan fellépő erők más természetűek, ezek a molekulák kölcsönhatásából erednek, vagyis belső erők, és így térfogati összegük szükségképpen zérus. Ha azonban a térfogatelem deformált állapotban van, a kötőerőknek a deformáció hatására történő megváltozása következtében a felületén olyan erők lépnek fel, melyek azt deformálatlan állapotába igyekeznek visszajuttatni. Ezen felületi erők eredője a következőképpen írható fel:

$$F'_i = \oint_S \sigma_{ik} dS_k \quad (11)$$

ahol  $S$  a  $V$  térfogatot magába foglaló zárt felület,  $dS_k$  pedig az  $x_k$  normálisú felületelem. A (11) egyenlet által definiált  $\sigma_{ik}$  feszültségtenzor komponenseinek jelentése leolvasható az erő kifejezéséből:  $\sigma_{ik}$  az egységnyi területű  $x_k$  normálisú felületelemre ható erő  $i$ -edik komponense. A felületi erők eredőjét is előállíthatjuk (10)-hez hasonlóan, ha (11)-et a Gauss-tétel segítségével térfogati integrállá alakítjuk:

$$F'_i = \int_V \sigma_{ik,k} dV = \int_V f'_i dV.$$

Ezzel a  $V$  térfogatban foglalt anyagra ható összes erők eredőjét egységesen, térfogati



integrál alakjában tudjuk megadni:

$$F_i + F'_i = \int_V (f_i + f'_i) dV.$$

Az egyensúly egyik feltétele nyilván az, hogy ez az eredő bármely  $V$  térfogatra eltűnjék, ami csak akkor lehetséges, ha a jobb oldal integrandusa eltűnik:

$$f_i + f'_i = f_i + \sigma_{ik'} k = 0. \quad (12)$$

Az egyensúly másik feltétele a forgatónyomatékok eredőjének eltűnése bármely  $V$  térfogatra. Az eredő forgatónyomatékokat a kétféle erő momentumainak összegeként kapjuk: (Feltéve, hogy más jellegű forgatónyomatékok a vizsgált testben nem lépnek fel)

$$M_i + M'_i = \varepsilon_{ikl} x_k (F_l + F'_l) = \int_V \varepsilon_{ikl} f_l x_k dV + \oint_S \varepsilon_{ikl} \sigma_{lj} x_k dS_j.$$

A felületi integrált ismét térfogati integrállá alakítjuk

$$\oint_S \varepsilon_{ikl} \sigma_{lj} x_k dS_j = \int_V \varepsilon_{ikl} (\sigma_{kj} x_l)_{,j} dV.$$

A jobb oldalon szereplő divergencia kifejezése:

$$(\sigma_{kj} x_l)_{,j} = \sigma_{kj,j} x_l + \sigma_{kj} \delta_{lj} = \sigma_{kj,j} x_l + \sigma_{kl}.$$

Ezzel az eredő forgatónyomaték és az egyensúlyi feltétele:

$$M_i + M'_i = \int_V \varepsilon_{ikl} (f_k + \sigma_{kj,j}) x_l dV + \int_V \varepsilon_{ikl} \sigma_{kl} dV = 0.$$

Az első tag az imént talált (12) egyensúlyi feltétel értelmében zérus, a második pedig a 2.1. § (2) tétele szerint akkor és csak akkor tűnik el, ha

$$\sigma_{kl} = \sigma_{lk}. \quad (13)$$

A rugalmas kontinuum egyensúlya tehát a (12) egyensúlyi feltétel teljesülésén kívül megköveteli a feszültségtenzor szimmetrikus voltát.

### 3.2. Hooke-törvény, mozgásegyenlet

A klasszikus rugalmasságtanban a feszültségek és a deformációk közt lineáris kapcsolatot tételezünk fel (Hooke-törvény):

$$\sigma_{ik} = C_{iklm} \varepsilon_{lm} \quad (14)$$

A  $C_{iklm}$  négyindexes tenzor a rugalmas állandók tenzora, amely 81 komponenset tartalmaz. Ezek a komponensek a legáltalánosabb esetben sem lehetnek függetlenek, mert mint már megmutattuk  $\sigma_{ik}$  és  $\varepsilon_{ik}$  szimmetrikusak, amiből következik, hogy  $C$ -re feltétlenül teljesülnie kell a következő szimmetria-relációknak:

$$C_{iklm} = C_{kilm};$$

$$C_{iklm} = C_{ikml}.$$



A deformációs energia levezetésénél meg fogjuk mutatni, hogy ezenkívül minden esetben teljesül a

$$C_{iklm} = C_{lmik} \quad (15)$$

egyenlőség is. E három szimmetriatulajdonság 21-re csökkenti a rugalmas állandók tenzorában a független komponensek számát.

Ha kihasználjuk a test szimmetriatulajdonságait, a független komponensek száma tovább csökkenthető, és izotróp testek esetében megmutatható, hogy csak két független rugalmas állandó létezik, melyekkel a  $C$  tenzor a következőképpen írható:

$$C_{iklm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + \mu (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}). \quad (16)$$

Ezt (14)-be helyettesítve

$$\sigma_{ik} = 2\mu \varepsilon_{ik} + \lambda_{ii} \delta_{ik}. \quad (17)$$

$\mu$  és  $\lambda$  az ún. Lamé-féle állandók, melyekkel kifejezhető az összes gyakorlatban használt rugalmas állandó. Ezeket az összefüggéseket itt csak közöljük, levezetésük megtalálható az irodalomban [3], [4].

$$\text{A Young-modulus: } E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\lambda + \mu},$$

$$\text{A Poisson-féle szám: } \nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}, \quad (18)$$

$$\text{A kompresszibilitás: } = \frac{3}{3\lambda + 2\mu},$$

### 3.3. Mozgásegyenletek

A térfogatelemre ható erők és az elmozdulások kapcsolatának ismeretében felírhatjuk a rugalmas kontinuumok általános mozgásegyenletét, Newton II. axiómáját alkalmazzuk a  $\varrho$  sűrűségű térfogatelemre:

$$dF_i = (\sigma_{ik,k} + f_i) dV = \varrho dV u_{i,tt}.$$

Bármely térfogatelemre ez csak úgy teljesülhet, ha minden pontban fennáll a

$$\sigma_{ik,k} + f_i = \varrho u_{i,tt} \quad (19)$$

egyenlet. Ez a rugalmas kontinuum általános mozgásegyenlete. A rugalmas állandók tenzorával átírható az  $u_i$  komponensekre vonatkozó parciális differenciálegyenlet rendszerré. Speciálisan izotróp anyagokra a térfogati erők elhagyásával különösen egyszerű alakban adható ez meg:

$$\sigma_{ik,k} = 2\mu \varepsilon_{ik,k} + \lambda \varepsilon_{kk,i} \delta_{ik} = \mu u_{i,kk} + (\lambda + \mu) u_{k,ki} = \varrho u_{i,tt}.$$

## 4. Deformációs energia

### 4.1. Kinetikus és potenciális energia

Egy test deformációja során a testben energia halmozódik fel. Ez az energia a test feszültségi állapotának következménye, várható tehát, hogy az ilyen állapotot jellemző deformációs és feszültségtenzorral megadható. A testben felhalmozott

energia az energiamegmaradás értelmében a külső erőknek a deformáció során végzett munkájával egyenlő, és ezt fogjuk kihasználni az energia kiszámítására.

Tekintsük a  $dV$  térfogatelemen annak  $\delta u_i$  elemi elmozdulása során végzett munkákat:

a térfogati erők munkája ( $f_i dV$ )  $\delta u_i$ ,

a felületi erők munkája ( $\sigma_{ik} dS_k$ )  $\delta u_i$ .

Összegezve a térfogatelemekre az egész testen végzett elemi munka:

$$\delta L = \int_V (f_i dV) \delta u_i + \oint_S (\sigma_{ik} dS_k) \delta u_i. \quad (20)$$

A második tagot Gauss tételének segítségével térfogati integrállá alakítjuk. Ehhez kiszámítjuk az integrandus divergenciáját:

$$(\sigma_{ik} \delta u_i)_k = \sigma_{ik,k} \delta u_i + \sigma_{ik} \delta (u_{i,k}) = \sigma_{ik,k} \delta u_i + \sigma_{ik} \frac{1}{2} \delta (\varepsilon_{ik}). \quad (21)$$

Itt feltételeztük, hogy  $(\delta u_i)_k = \delta (u_{i,k})$  és kihasználtuk, hogy  $\sigma_{ik}$  szimmetrikus, tehát  $\sigma_{ik} \delta u_{i,k} = \sigma_{ik} \delta u_{k,i}$ . (21)-et (20)-ba helyettesítve az elemi munkavégzés:

$$\delta L = \int_V (f_i + \sigma_{ik,k}) \delta u_i dV + \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik} dV.$$

Az első tag integrandusát a (19) mozgásegyenletek alapján átalakítva nyilvánvalóvá válik, hogy az a térfogategységben foglalt anyag kinetikus energiájának megváltozása:

$$\begin{aligned} (f_i + \sigma_{ik,k}) \delta u_i &= \rho u_{i,t} \delta u_i = \rho u_{i,t} u_{i,t} \delta t = \\ &= \frac{1}{2} \rho \delta (u_{i,t})^2 = \delta \left( \frac{1}{2} \rho u_{i,t}^2 \right) \end{aligned} \quad (22)$$

Az első integrál tehát a test teljes kinetikus energiájának megváltozását adja, a másodikat pedig a potenciális energia megváltozásával azonosítjuk,

$$\delta L = \int_V \delta K dV + \frac{1}{2} \int_V \delta P dV.$$

A  $\delta K$  kinetikus energia változás, mint az a (22) képletből látható, mindig teljes differenciál. Kérdés, hogy a

$$\delta P = \frac{1}{2} \sigma_{ik} \delta (\varepsilon_{ik}) \quad (23)$$

potenciális energia változás megadható-e mint teljes differenciál. Ha a deformáció előtti és utáni állapotok egyensúlyi állapotoknak tekinthetők, erre a kérdésre a termodinamika első főtétele alapján kapjuk meg a választ. Két esetet különböztetünk meg aszerint, hogy a test adiabatikus vagy izotermikus állapotváltozáson megy keresztül a deformáció során.

(1) Adiabatikus állapotváltozás (gyors deformáció) esetén hőátadás nincs, ezért az első főtétel értelmében

$$\delta L = -dU,$$

vagyis a végzett munka teljes differenciál. Következésképpen a (23) kifejezésnek is annak kell lennie, mert ha a kezdeti és végállapotok egyaránt egyensúlyi állapotok a (22) kinetikus energia-tag a (12) egyensúlyi feltétel értelmében eltűnik.



(2) Izotermikus állapotváltozás (sztatikus deformáció) esetén a cserélt hő az entrópia segítségével teljes differenciálként fejezhető ki, és így a végzett munka megint csak teljes differenciál, mert kifejezhető a szabad energia megváltozásával:

$$\delta L = d(TS - U) = -dF$$

Ebből az előbbi gondolatmenettel ismét belátható, hogy a potenciális energia megváltozásának is teljes differenciálnak kell lennie.

Mindkét esetben meg kell tehát követelnünk, hogy (23) teljes differenciál legyen, aminek az a feltétele, hogy

$$\sigma_{ik} = \frac{\partial \delta P}{\partial \varepsilon_{ik}} \quad (24)$$

teljesüljön. Fejtsük sorba  $\delta P$ -t a feszültségmentes állapot környezetében, és képezzük ennek segítségével a (24) parciális deriváltakat:

$$\delta P = a_0 + a_{ik} \varepsilon_{ik} + \frac{1}{2} a_{iklm} \varepsilon_{ik} \varepsilon_{lm}, \quad (25)$$

$$\sigma_{ik} = \frac{\partial \delta P}{\partial \varepsilon_{ik}} = a_{ik} + \frac{1}{2} a_{iklm} \varepsilon_{lm} + \frac{1}{2} a_{lmik} \varepsilon_{lm} = a_{ik} + a_{iklm} \varepsilon_{lm}. \quad (26)$$

Az utolsó lépésben kihasználtuk, hogy az  $a_{iklm}$  sorfejtési együtthatók parciális deriváltak, és így teljesül rájuk az

$$a_{iklm} = a_{lmik} \quad (27)$$

összefüggés. Ha a feszültségmentes állapotot választjuk alapállapotnak, vagyis az ahhoz tartozó energiát választjuk a potenciális energia zéruspontjának, és azt tekintjük deformálatlan állapotnak (melyben  $\varepsilon_{ik} = 0$ ), akkor (25)-ből leolvashatjuk, hogy  $a_0 = 0$ , (26)-ból pedig, hogy  $a_{ik} = 0$ . Ennek felhasználásával, továbbá (26) és (14) összevetésével adódik, hogy az  $a_{iklm}$  sorfejtési együtthatók a rugalmas állandók tenzorának elemeivel azonosak, és így (27) a (15) szimmetriatulajdonságot bizonyítja. A térfogategység potenciális energiája ezek alapján felírható, mint a feszültségek és deformációk szorzata:

$$\delta P = \frac{1}{2} C_{iklm} \varepsilon_{ik} \varepsilon_{lm} = \frac{1}{2} \sigma_{ik} \varepsilon_{ik},$$

a test teljes deformációs potenciális energiája pedig térfogati integrál formájában adható meg:

$$P = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} dV. \quad (28)$$

Ha a térfogati erők hatása elhanyagolható, a (28) integrál felületi integrállá alakítható, ebben az esetben ugyanis az integrandus divergenciává alakítható át:

$$\sigma_{ik} \varepsilon_{ik} = \sigma_{ik} u_{i,k} = (\sigma_{ik} u_i)_{,k} \quad (29)$$

Az átalakítás során kihasználtuk, hogy  $\sigma_{ik}$  szimmetrikus és hogy a deriválás ki-



terjesztésekor figyelmen kívül hagyott  $\sigma_{ik,k}u_i$  összeg  $f_i=0$  esetén (12) értelmében zérus. (29)-et (28)-ba helyettesítve megkapjuk a deformációs energiát mint a test felületére vett integrált:

$$P = \frac{1}{2} \int_V (\sigma_{ik} u_i)_{,k} dV = \frac{1}{2} \oint_S \sigma_{ik} u_i dS_k. \quad (30)$$

Az energia (30) kifejezése előnyösen alkalmazható a diszlokációk elméletében. Ha ugyanis végtelen kontinuumban elhelyezkedő diszlokációt vizsgálunk és feltételezzük, hogy a feszültségek a végtelenben eltűnnek, a felületi integrált csak a bevezetésben említett kirekesztett tartomány határfelületére kell képezni. Ez a felület az I. rész 4. §-ában leírt gondolat kísérletben szereplő vágási felületet foglalja magába és határesetben annak két oldalát végtelen pontosan megközelíti.

#### 4.2. Deformációk szuperpozíciója, kölcsönhatási energia

A Hooke-törvény linearitása miatt a rugalmas kontinuumok elméletében érvényesül a szuperpozíció elve, vagyis ha  $\varepsilon_{ik}^A$  és  $\varepsilon_{ik}^B$  két független deformáció,  $\sigma_{ik}^A$  és  $\sigma_{ik}^B$  pedig a hozzájuk tartozó feszültségek, akkor a két deformáció egymásutáni elvégzése az

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ik}^A + \varepsilon_{ik}^B$$

eredő deformációhoz vezet, amely

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}^A + \sigma_{ik}^B$$

feszültségekkel jár. Az eredő deformáció kialakulása során felhalmozódó rugalmas energia a következőképpen írható fel:

$$P = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ik}^A \varepsilon_{ik}^A dV + \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ik}^B \varepsilon_{ik}^B dV + \frac{1}{2} \int_V (\sigma_{ik}^A \varepsilon_{ik}^B + \sigma_{ik}^B \varepsilon_{ik}^A) dV = E_S^A + E_S^B + E_K. \quad (31)$$

Az  $E_S^A$  és  $E_S^B$  mennyiségeket az  $\varepsilon_{ik}^A$  és  $\varepsilon_{ik}^B$  deformációkhoz tartozó sajátenergiáknak nevezzük,  $E_K$  pedig a kölcsönhatási energia. Könnyű megadni a kölcsönhatási energia fizikai jelentését: a deformált anyag további deformációja nagyobb munkavégzést igényel, mint a kezdeti deformáció, mert akkor az anyagban már meglevő feszültségek ellen is munkát kell végezni. A Hooke-törvény alapján a kölcsönhatási energia egyszerűbb alakba írható. Könnyen belátható ugyanis, hogy

$$\sigma_{ik}^A \varepsilon_{ik}^B = \sigma_{ik}^B \varepsilon_{ik}^A,$$

és így

$$E_K = \int_V \sigma_{ik}^A \varepsilon_{ik}^B dV = \int_V \sigma_{ik}^B \varepsilon_{ik}^A dV. \quad (32)$$

A sajátenergia és a kölcsönhatási energia a diszlokációk elméletében igen hasznos fogalmak. A fenti definíció alapján ugyanis minden diszlokációhoz sajátenergia rendelhető, amelynek értéke független a test egyéb deformációitól. Ha egyidejűleg több diszlokáció is van a testben, ezek összenergiája egyértelműen felbontható a sajátenergiák és a kölcsönhatási energiák összegére.



### 5. A rugalmas kontinuum alapegyenletének általános megoldása

A rugalmas kontinuum egyensúlyi feltételét a (12) egyenlettel adtuk meg, és ezt kiegészítettük a  $\underline{\sigma}$  szimmetrikus voltát előíró (13) egyenlettel. A Hooke-törvény értelmében a  $\underline{\sigma}$  és  $\underline{\varepsilon}$  tenzorok közt egyértelmű kapcsolat áll fenn, ez utóbbi pedig a (7) kompatibilitási feltétel teljesülése esetén egyértelműen meghatározza az  $\underline{u}$  elmozdulásteret. A (12) egyenlet tehát, amely a feszültségtenzor és a térfogati erő-sűrűség közt állapít meg kapcsolatot, lényegében az elmozdulásvektor terét adja meg a térfogati erő-sűrűség segítségével. Erről meggyőződhetünk a  $\sigma_{ik,k}$  divergencia azonos átalakításával:

$$\sigma_{ik,k} = C_{iklm} \varepsilon_{lm,k} = C_{iklm} u_{l,mk}.$$

Ezt (12)-be helyettesítve

$$C_{iklm} u_{l,mk} = -f_i. \quad (33)$$

Ez az egyensúlyban levő rugalmas kontinuum alapegyenlete, amelyben az  $u_i$  elmozdulástér és az elmozdulástér forrásának tekinthető  $f_i$  térfogati erő-sűrűség kapcsolata van adva. Nyilvánvalóan kíváncsi lenne az egyenlet megoldásának explicit megadása, amely lehetővé teszi adott  $f_i$  esetén  $u_i$  konkrét kiszámítását. A megoldáshoz vezető utat egy elektrosztatikai analógiával világíthatjuk meg.

Az elektrosztatika alapegyenlete a

$$\Delta \Phi = -4\pi \varrho \quad (34)$$

Laplace-egyenlet, amely megadja a skalárpotenciál és a tér forrásaként szereplő töltéssűrűség kapcsolatát. Az egyenlet általános megoldását

$$\Phi = \int \varrho(\vec{r}') U(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (35)$$

alakban állítjuk elő az  $U$  Green-függvény segítségével, és ennek (34)-be való helyettesítésével keressük meg a Green-függvényt meghatározó egyenletet:

$$\Delta \Phi = \int \varrho(\vec{r}') \Delta U(\vec{r} - \vec{r}') dV' = -4\pi \varrho(\vec{r}). \quad (36)$$

Látható, hogy az egyenlőség akkor állhat csak fenn, ha az  $U$  Green-függvény eleget tesz az

$$U(\vec{r}) + 4\pi \delta(\vec{r}) = 0 \quad (37)$$

egyenletnek, ahol  $\delta(\vec{r})$  a Dirac-féle  $\delta$  függvény. Ennek megoldása

$$U = \frac{1}{r}, \quad (38)$$

amivel a (34) egyenlet megoldása zárt alakban előállítható:

$$\varphi(\vec{r}) = \int \frac{\varrho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV'.$$

Hasonló utat követhetünk a (33) egyenlet megoldásánál. Az egyenlet formailag hasonló (34)-hez, csak a keresett tér és annak forrása itt nem skalártér, hanem

vektortér. Keressük tehát a megoldást (35) analógiájára

$$u_i(\vec{r}) = \int f_j(\vec{r}') U_{jl}(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (39)$$

alakban, és ennek (33)-ba való helyettesítésével állapítsuk meg, milyen egyenletet kell az  $U_{jl}$  kétindexes Green-függvénynek kielégítenie:

$$C_{iklm} u(\vec{r})_{l,mk} = f_j(\vec{r}') C_{iklm} U_{jl,mk}(\vec{r} - \vec{r}') dV' = -f_i(\vec{r}). \quad (40)$$

Ez csak akkor teljesül, ha  $U$  kielégíti a

$$C_{iklm} U_{jl,mk}(\vec{r}) + \delta_{ij} \delta(\vec{r}) = 0 \quad (41)$$

egyenletet. Ha meghatározzuk ennek általános megoldását, elértük célunkat, mert (39)-ben megadtuk, hogyan határozható meg az elmozdulástér a térfogati erőssűrűség ismeretében. A (41) egyenlet megoldásánál csak izotróp testekre szorítkozunk. Helyettesítsük be (41)-be az izotróp test rugalmas állandóinak (16) kifejezését:

$$\mu U_{ji,kk}(\vec{r}) + (\lambda + \mu) U_{jk,ik}(\vec{r}) + \delta_{ij} \delta(\vec{r}) = 0. \quad (42)$$

Keressük az egyenlet megoldását

$$U_{jl} = A r_{,jl} + B r_{,kk} \delta_{jl}; \quad r = \sqrt{x_k x_k} \quad (43)$$

alakban, és ennek behelyettesítésével határozzuk meg az  $A$  és  $B$  állandók értékét

$$\begin{aligned} (A r_{,ijkk} + B r_{,llkk} \delta_{ij}) + (\lambda + \mu) [A r_{,jkik} + B r_{,llik} \delta_{jk}] + \delta_{ij} \delta(\vec{r}) = \\ = \delta_{ij} \delta(\vec{r}) (1 - 8\pi B \mu) + [(\lambda + 2\mu) A + (\lambda + \mu) B] r_{,ijkk} = 0. \end{aligned} \quad (44)$$

Átalakításaink során többször kihasználtuk a Young-tételt és felhasználtuk az  $r_{,kk} = 2/r$  és  $r_{,kkll} = -8\pi \delta(\vec{r})$  azonosságokat. A (44) egyenlőség csak akkor teljesül azonosan, ha

$$B = \frac{1}{8\pi\mu} \quad \text{és} \quad A = -\frac{(\lambda + \mu)B}{\lambda + 2\mu}$$

Ezeket (43)-ba helyettesítve megkapjuk az izotróp testek Green-függvény tenzorát:

$$U_{ij} = \frac{1}{8\pi\mu} \left[ \delta_{ij} r_{,kk} - \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} r_{,ij} \right]. \quad (45)$$

A (39) és (45) egyenletek segítségével bármely pont elmozdulása meghatározható a térfogati erők ismeretében. Felmerül a kérdés, mi a helyzet, ha nincsenek térfogati erők? A (39) egyenlet ebben az esetben nyilvánvalóan zérus elmozdulást ad meg minden pontban, és ez várható is, ha végtelen kiterjedésű kontinuumról van szó. A gyakorlatban azonban mindig véges kiterjedésű testekkel van dolgunk, ezért azt várjuk, hogy ezekben a térfogati erők eltűnése esetén is elmozdulást okozhatnak a felületen alkalmazott feszültségek. Megmutatjuk, hogy ez valóban így van, ha  $f_i = 0$ , a Green-függvény segítségével kifejezhető bármely pont elmozdulása felületi integrál formájában.



Ehhez az összefüggéshez kissé körülményes úton juthatunk csak el, mert a (39) térfogati integrál közvetlen felületi integrállá való átalakítása nem lehetséges. Képezzük a

$$T_{jk} = u_i(\vec{r}') C_{iklm} U_{jm,l}(\vec{r} - \vec{r}') - \sigma_{mk}(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}')$$

tenzor divergenciáját

$$T_{jk,k} = u_i(\vec{r}') C_{iklm} U_{jm,lk}(\vec{r} - \vec{r}') - \sigma_{mk,k}(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}').$$

A jobb oldal első tagja (41) szerint  $u_i(\vec{r}') \delta_{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ -vel egyenlő, második tagja pedig (12)-ből  $f_m(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}')$ -nek adódik, ami feltevés szerint eltűnik. Írjuk fel a Gauss-féle integráltételt  $T_{jk}$  vesszős koordináták szerinti integráljaira:

$$\begin{aligned} \int_V T_{jk,k} dV' &= \oint_S T_{jk} dS'_k - \\ &- \int_V u_i(\vec{r}') \delta_{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}') dV' = \\ &= \oint_S [u_i(\vec{r}') C_{iklm} U_{jm,l}(\vec{r} - \vec{r}') - \sigma_{mk}(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}')] dS'_k. \end{aligned}$$

A térfogati integrálást a delta-függvény segítségével elvégezve, az elmozdulásvektornak a kívánt előállítását kapjuk:

$$u_j(\vec{r}) = \oint_S [\sigma_{mk}(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}') - u_i(\vec{r}') C_{iklm} U_{jm,l}(\vec{r} - \vec{r}')] dS'_k. \quad (46)$$

A (46) formulának a diszlokáció elméletében a (30) formulával kapcsolatos megjegyzésünk következtében kiemelkedő jelentősége van. A felületi integrált itt is a kirekesztett tartományt határoló felület mentén kell számítani. Ez a felület az I. rész 4. §-ában definiált vágási felületet közelíti meg két oldalról, tehát elegendő a feszültségek és elmozdulások értékét a vágási felületen megadni. Ezeket viszont éppen a diszlokációk létrehozását leíró gondolat kísérletből ismerjük: a  $\sigma_{ik}$  komponensek azonosan eltűnnek,  $\vec{u}$  értéke pedig állandó, és egyenlő a Burgers-vektorral.

## IRODALOM

- [1] Kovács István, Magyar Fizikai Folyóirat 3, 181, 1965.
- [2] A. E. H. Love, A treatise on the mathematical theory of elasticity IV. ed. New York, Dover Publications 1944.
- [3] A. Sommerfeld, Mechanik der deformierbaren Medien, Leipzig, Akademik Verlag 1964.
- [4] Budó Ágoston, Mechanika 3. kiadás Budapest, Tankönyvkiadó 1964.





# NAGY ELEKTROMOS VEZETŐKÉPESSÉGŰ FOLYADÉKOK ÉS OLDATOK DIELEKTROMOS JELLEMZŐINEK NÉHÁNY MÉRÉSI PROBLÉMÁJA MIKROHULLÁMÚ FREKVENCIA TARTOMÁNYBAN\*

BERECZ ENDRE és GELLÉN GYÖRGY

(Nehézipari Műszaki Egyetem, Általános és Fizikai kémiai Tanszék, Miskolc)

Erős elektrolitok oldatai szerkezeti sajátságainak felderítésére igen alkalmas a dielektromos sajátságok koncentráció és hőmérsékletfüggésének ismerete, ill. mérése. E célból tanulmányoztuk a dielektromos permeabilitás és fajlagos vezetőképesség mikrohullámú frekvenciatartományban történő mérésének problémáit a nagy vezetőképességű folyékony dielektrikumok esetében. Két olyan alapvető mérési eljárást — a reflexiós és áteresztő módszert — vizsgáltunk meg a pontosság és technikai megvalósíthatóság szempontjából, amelyek egyszerű elemekből építhetők össze, ugyanakkor viszont a mérési és keresett értékek közötti szükséges összefüggések pontosan levezethetők. Kimutattuk, hogy a reflexiós módszer a mérések különös gonddal történő végrehajtásának esetében is legfeljebb arra alkalmas, hogy vizes oldatok komplex dielektromos tényezőiről tájékoztató jellegű adatokat szolgáltatasson, vagy a komplex dielektromos permeabilitás jelentős változásait (pl. a koncentráció függvényében) észlelhetővé tegye. Az áteresztő módszer jobb alkalmazási lehetőséget rejt magában, segítségével a vezetőképességnek már kis változásai is kimutathatók.

## Bevezetés

Folyadékok és elektrolitoldatok szerkezeti tulajdonságainak vizsgálatában igen hasznos ezen anyagok dielektromos jellemzőinek ismerete. Dielektromos jellemzők alatt elsősorban a dielektromos permeabilitást és a fajlagos elektromos vezetőképességet értjük. A kényelmes kezelhetőség érdekében azonban gyakran a fenti mennyiségekből származtatott dielektromos veszteségi tényezőt, a dielektromos veszteségi szöget, illetve ennek tangensét szokásos használni. Folyadékok dielektromos jellemzői függvényei a frekvenciának, a hőmérsékletnek, az oldatok dielektromos tulajdonságai pedig a fenti tényezőkön kívül a koncentrációnak is függvényei.

A dielektromos jellemzők mérésének módszerei egyenáramon és mérsékelt frekvenciájú váltóáramú tartományban kidolgozottak, bár a dielektromos jellemzők különböző tényezőktől való függésének megállapítása már ezekben az esetekben is igen sok méréstechnikai problémát vet fel.

Lényegesebben bonyolultabbak a dielektromos sajátságok mérési lehetőségei elektrolitoldatok esetében. Alacsony frekvencián történő mérések esetében ugyanis a nagy vezetőképesség, ill. a veszteségi szög igen nagy mértékben csökkenti a meghatározási pontosságot és még ezekkel a feltételekkel is legfeljebb csak igen híg oldatban alkalmazhatók. Ha tehát megfelelő felvilágosításokat kívánunk kapni az elektrolitoldatok dielektromos sajátságairól — ami a legszorosabb kapcsolatban van a szerkezettel —, ill. ilyen irányú vizsgálatainkat ki óhajtjuk terjeszteni az adott hőmérsékleten lehetséges teljes koncentrációintervallumra, úgy vizsgálatainkkal át kell mennünk a mikrohullámú frekvenciatartományba, ami azonban nem kevés metodikai, apparatív és számolási nehézséget rejt magában.

\*1965. febr. 20.



A dielektromos jellemzők mérésének a mikrohullámú frekvenciatartományban is sokféle változata van. Habár a mikrohullámú frekvenciatartományban a mérési módszerek és mérőberendezések pontossága általában elmarad az alacsonyabb frekvenciatartományok lehetőségei mellett, az ismert módszerek kielégítőek abban az esetben, ha a vizsgált anyag mérsékelt veszteséggel rendelkezik. Elektrolitoldatok vizsgálata esetében azonban olyan anyagokkal van dolgunk, amelyek nagy veszteségi szögűek, ami azt vonja maga után, hogy ebben az esetben fokozott követelményekre kell felkészülni a mérések pontosságát illetően.

Részletesebben elemezve a szóban forgó mikrohullámú mérések pontosságát a következőkre kell figyelemmel lenni. Valamely mikrohullámú mérés pontosnak mondható, ha néhány százalékos hibával elvégezhető. Adott esetben ez csak akkor megfelelő, ha ez a hiba a végeredményben nem jelentkezik fokozott mértékben és néhány százalékos változás a dielektromos jellemzőkben biztonsággal kimutatható.

A dielektromos jellemzők mikrohullámú frekvenciatartományban történő mérése esetében maga a mérés nem szolgáltatja közvetlenül a keresett értékeket, hanem ezek a mért értékekből számolás útján kaphatók meg. A számítás alapjául szolgáló összefüggések többnyire közelítőek s ezen közelítő összefüggések hibái jelentősek lehetnek kis változások kimutatása esetében. Magának a mérési folyamatnak és eredményének a hibái szisztematikus és véletlen jellegű hibák lehetnek. A szisztematikus hibák — ide sorolható a közelítő jellegű összefüggések használata is — a mérés abszolút pontosságára vannak elsősorban befolyással, míg a véletlen jellegű hibák a dielektromos jellemzők megváltozásának észlelését akadályozzák. Ez utóbbi állítást mindenestre megfelelő óvatossággal kell kezelni és semmiképpen sem mint általános törvényszerűséget. Két mért értéknek két keresett értékre történő átszámításakor előfordulhat, hogy a mérés és számítás eredményeként nem annál a mennyiségnél mutatjuk ki a kis változást, amelynél a változás a valóságban történt. További részletek mellőzésével elöljáróban megjegyezzük, hogy a teljes mérési folyamat csak akkor nevezhető alkalmasnak, ha a tulajdonképpeni mérés és az átszámítás is egyszerűen és kellő pontossággal elvégezhető. Ezek a követelmények még fokozottan állanak fenn sorozatmérések esetében, amikor nagyszámú mérést kell elvégezni és kiértékelni. Esetünkben, amikor a dielektromos jellemzőkre, mint a koncentráció függvényére vagyunk kíváncsiak éppen ez az eset áll fenn. Előfordulhat az az eset is, hogy a tulajdonképpeni mérés alkalmas sorozatmérésre, az átszámítás azonban nem, és így adott mérési módszer alkalmazását mellőzni kell.

A dielektromos jellemzők mérésére szolgáló módszerek sokféleségük mellett két alapvető csoportba sorolhatók, és pedig rezonáns módszerekre és nonrezonáns módszerekre. A rezonáns módszer alapelve az, hogy ha a vizsgált anyagmintát mikrohullámú rezgőkörbe helyezük, megváltozik az utóbbi rezonancia frekvenciája és jósági tényezője. A nonrezonáns módszer alapelve viszont az, hogy ha a vizsgált anyagmintát mikrohullámú tápvonalba helyezük, az utóbbiban megváltoznak az elektromágneses hullámok terjedési viszonyai. Elvileg mindkét mérési módszernek lehetséges derékszögű és hengersizmetrikus kivitele, a gyakorlatban azonban a rezonáns módszer általában hengersizmetrikus, a nonrezonáns módszer pedig derékszögű elrendezésben fordul elő. Miután a fentiekben mint követelményt a számítások egyszerűségét tűztük ki és ez — mint ismeretes — a derékszögű elrendezés esetében valósul meg jobban, ha egyéb kényszerítő okok nem állnak fent, úgy célszerű a mérések céljára nonrezonáns módszert választani.

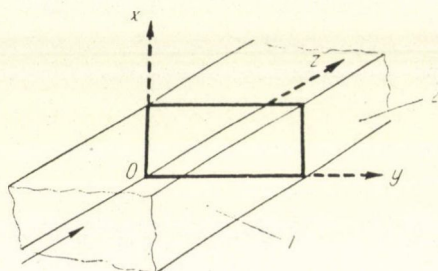


Jelen közleményünkben ezért a nonrezonáns módszert, ill. annak két alapszabályát, a reflexiós és áteresztő módszert vizsgáltuk meg abból a szempontból, hogy alkalmas-e elektrolitoldatok és folyadékok dielektromos jellemzőinek mérésére.

A nonrezonáns alapvetelést használó mérési módszerek a főismérvet tekintve két csoportra bonthatók: reflexiós módszerre és áteresztő módszerre. E két mérési módszert a továbbiakban részletesen tárgyaljuk és ekkor feleletet kapunk lényegük mibenlétére is.

### A reflexiós mérési módszer

A reflexiós mérési módszer alapelve az, hogy ha egy csőtápvonalba diszkontinuitást helyezünk el, arról az eme csőtápvonalban terjedő elektromágneses hullám visszaverődik. A visszaverődés mértéke és fázisa jellemző a diszkontinuitásra. [1]. Az adott esetben a diszkontinuitást úgy hozzuk létre, hogy a tápvonal egy részét az elektromágneses hullám terjedési irányára merőlegesen elzárjuk — például egy csillámablakkal — és az elzárt tápvonalszakaszt a mérendő folyékony dielektrikummal töltjük ki, megváltoztatva ezáltal a lezárt térrészben a dielektromos permeabilitást ( $\epsilon$ ) és a fajlagos elektromos vezetőképességet ( $\sigma$ ). A diszkontinuitásra beeső és onnan visszavert elektromágneses hullámok egy adott állóhullámarányt alakítanak ki a csőtápvonalban, amely állóhullámaránymérő segítségével mérhető és a mérési eredményekből a keresett mennyiségek kiszámíthatók.



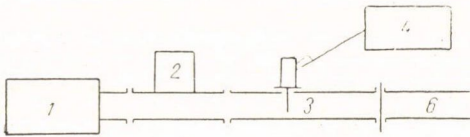
1. ábra

Ismeretes, hogy valamely csőtápvonalban (1. ábra) általános esetben az elektromágneses energia különböző módusok alakjában terjed. Ezek a módusok a csőtápvonalban egyidejűleg is létezhetnek a gerjesztés módjától függően. Ezen módusok között van egy módus, az ún. alaplómódus, amelyre érvényes, hogy

- a) transzverzális elektromos hullám; ez azt jelenti, hogy a hullám terjedési irányával párhuzamos elektromos térerőkomponens zérus. Az 1. ábra jelölésével  $E_z = 0$ .
- b) az elektromos és mágneses térerősségek komponensei függetlenek az egyik transzverzális (a derékszögű hullámvezető rövidebb oldalával párhuzamos) koordinátától. Az 1. ábra jelölésében a térerősségek függetlenek lesznek  $x$ -től.

Az alaplómódust a módusok szokásos jelölésében  $H_{01}$ -el, vagy TEM-el jelezzük. A tápvonalméretek megfelelő megválasztásával elérhető, hogy adott frekvencia mellett csakis az alaplómódus terjedjen csillapodás nélkül (ideális vezetőléből készült hullámvezető esetében). A többi módus számára az ilyen hullámvezető határfrekvencián túli csillapítót jelent. A méréseket éppen ebben az alaplómódusban szokásos elvégezni, mert ebben az esetben olyan zavaró jelenség, mint a módus-konverzió, nem léphet fel. A méréseket célszerűen derékszögű csőtápvonalban végezve, a probléma Descartes-koordináta-rendszerben egyszerűen tárgyalható.

Utalva az 1. ábrára, az elektromágneses hullám forrását  $z = -\infty$ -be képzeljük; a beeső hullám pozitív irányba terjed. A tápvonalat mindkét irányban végtelennek tekintjük; a reflexiót okozó diszkontinuitás a  $z=0$  síkban van elhelyezve.  $z$  negatív értékei mellett mérjük az állóhullámarányt (az idevonatkozó mennyiségeket 1-es indexxel jelöljük),  $z$  pozitív értékei mellett a tápvonal a mérendő dielektri-



2. ábra. 1 — klisztron generátor; 2 — frekvenciamérő; 3 — állóhullámaránymérő; 4 — szelektív erősítő és V-mérő; 5 — csillám ablak; 6 — csőtápvonal a mérendő anyaggal

kummal van kitöltve (az idevonatkozó mennyiségeket 2-es indexxel jelöljük). A reflexiós módszer teljes mérési összeállításának elvi vázlata a 2. ábrán látható.

Az elektromos térerősség meghatározására a mérőrendszer két szakaszban, és a mért állóhullámarány és a keresett dielektromos permeabilitás közötti összefüggés megállapítására a Maxwell-egyenletekből indultunk ki.

A vonatkozó Maxwell-egyenleteket és a határfeltételeket kielégítő megoldás bármely szakaszban, figyelembe véve, hogy csak az alapmódus létezhet:

$$E_x = E \sin \pi \frac{y}{b} e^{i(\omega t - \gamma z)} \quad (1)$$

$$H_y = \frac{c\gamma}{\mu\omega} E \sin \pi \frac{y}{b} e^{i(\omega t - \gamma z)} \quad (2)$$

$$H_z = -i \frac{\pi c}{\mu\omega b} E \cos \pi \frac{y}{b} e^{i(\omega t - \gamma z)} \quad (3)$$

A megoldást a szokásos komplex formalizmusnak megfelelően írtuk fel és megoldás gyanánt a fenti kifejezések valós részét kell venni. E műveletek eredményeképpen a  $\gamma$  terjedési állandó meghatározására a diszperzió egyenletnek nevezett összefüggést kapjuk:

$$\gamma^2 + \frac{\pi^2}{b^2} - \frac{\mu\epsilon}{c^2} \omega^2 + i \frac{\mu 4\pi}{c^2} \omega\sigma = 0 \quad (4)$$

Bevezetve a komplex dielektromos permeabilitás fogalmát az

$$\vartheta = \epsilon - i4\pi \frac{\sigma}{\omega} \quad (5)$$

meghatározása szerint, a (4) diszperzió egyenletre megkapjuk, hogy

$$\gamma^2 + \frac{\pi^2}{b^2} - \frac{\mu\vartheta}{c^2} \omega^2 = 0,$$

ill.

$$\gamma = \pm \sqrt{\frac{\mu\vartheta}{c^2} \omega^2 - \frac{\pi^2}{b^2}} \quad (6)$$



A (6) egyenletből  $\gamma$ -ra két értéket kapunk; az egyik érték a beeső hullámnak, a másik a reflektált hullámnak felel meg. Általános megoldás a beeső és reflektált hullámok lineáris kombinációja lesz.

A beeső hullám terjedési állandója a pozitív előjellel vett gyök, következésképpen ez a hullám pozitív irányban halad. A reflektált hullám terjedési állandója a negatív előjellel vett gyök, következésképpen ez a hullám negatív irányba terjed. A beeső és reflektált hullámok jelölésére a továbbiakban  $+$ , illetve  $-$  indexet fogunk használni.

A fentieknek megfelelően négy ismeretlen állandónk van:  $E_{1+}$ ,  $E_{1-}$ ,  $E_{2+}$  és  $E_{2-}$ . Ezek közül  $E_{2-} = 0$ , mert a mérőszakaszt, amely veszteséges, végtelennek tételeztük fel. A további állandókat két egyenlet kapcsolja egybe, amelyek a  $z = 0$  határfelületen biztosítják a határfeltételek teljesülését. Ezek

$$E_{x1}|_{z=0} = E_{x2}|_{z=0} \quad (7)$$

$$H_{y1}|_{z=0} = H_{y2}|_{z=0} \quad (8)$$

illetve ezekből további következményként

$$E_{1+} + E_{1-} = E_{2+} \quad (9)$$

ill.

$$\gamma_1 E_{1+} - \gamma_1 E_{1-} = \gamma_2 E_{2+} \quad (10)$$

amely egyenletekből  $E_{1-}$ -ra a következő kifejezés írható fel:

$$E_{1-} = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} E_{1+} \quad (11)$$

Az ebben az összefüggésben szereplő  $\left(\frac{E_{1-}}{E_{1+}}\right)$  tényezőt reflexiós tényezőnek nevezzük és  $R$ -rel jelöljük:

$$R = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (12)$$

Figyelembe véve, hogy az 1-es szakaszban  $\varepsilon = 1$ , és figyelembe véve (5) (6) és (12)-t, megkapjuk a reflexiós tényező és a keresett komplex dielektromos permeabilitás közötti összefüggést:

$$\frac{\mu(\partial - 1)}{c^2} \omega^2 = -\gamma_1^2 \frac{4R}{(1+R)^2}. \quad (13)$$

(13) összefüggés abban az esetben használható, ha a mérés elvégzéséhez megfelelő reflektométer áll rendelkezésre. Ha viszont a mérés állóhullámaránymérővel történik — mint hogy az a 2. ábrán látható —, úgy más összefüggést kell használni, amelyet a következőképpen vezethetünk le. (1) és (11)-nek megfelelően a tápvonal 1-es szakaszában a beeső és visszavert hullám összege

$$\begin{aligned} E_{x1} &= E_{1+} e^{i(\omega t - \gamma_1 z)} + \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} E_{1+} e^{i(\omega t + \gamma_1 z)} = \\ &= E_{1+} \left( 1 + \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} e^{+i2\gamma_1 z} \right) e^{i(\omega t - \gamma_1 z)} \end{aligned} \quad (14)$$

ahol az  $y$  koordinátától függő tényezőt, mint adott esetben lényegtelen nem írtuk ki, mivel az az 1-es és 2-es szakaszokban is ugyanaz.

Az exponenciális tag előtt álló tényező egy térbeli „burkoló görbét” határoz meg; az állóhullámaránymérővel éppen ezt a burkoló görbét tapogatjuk végig.

Az állóhullámarány mérése eredményeképpen a következő két mennyiséget nyerjük:

az állóhullámarányt:  $h = E_{\max}/E_{\min}$  és

a térerősség-minimum helyzetet:  $z = -z_0$ .

Az  $R$  reflexiós tényező, amely komplex mennyiség, a következő alakban állítható elő:

$$R = |R|e^{i\Delta} \quad (15)$$

ahol  $\Delta$  a reflexiós tényező fázisszöge.

A (15) egyenletben szereplő  $|R|$  és  $\Delta$  értékére a mért mennyiségekkel összekapcsolva a következő egyenletek írhatók fel:

$$h = \frac{1 + |R|}{1 - |R|} \quad (16)$$

ill.

$$-2\gamma_1 z_0 + \Delta = -\pi \quad (17)$$

Ezen utóbbi két összefüggésből és a (15)-ből

$$R = \frac{1 - h}{1 + h} e^{i2\gamma_1 z_0}. \quad (18)$$

(12), (13) és (18) egyenletek felhasználásával végül is megkapjuk a numerikus számolásra legalkalmasabb egyenletet:

$$\frac{(\cos \gamma_1 z_0 - ih \sin \gamma_1 z_0)^2}{h^2 - 1} = \frac{\lambda_0^2}{\lambda^2} \frac{1}{\vartheta - 1}, \quad (19)$$

ahol  $\lambda_0$  a szabadtéri hullámhossz és  $\lambda$  a hullámhossz a tápvonalban. Miután esetünkben elektrolitoldatok esetében rendszerint teljesül az a feltétel, hogy  $h^2 \ll 1$  és  $\gamma_1 z_0 \approx 0$ , közelítő egyenletet is használhatunk, amely a következő alakú:

$$\left( \frac{1}{h} - i\gamma_1 z_0 \right)^2 = \frac{\lambda_0^2}{\lambda^2} \frac{1}{\vartheta - 1} \quad (20)$$

A mérések folyamán hitelesítő dielektrikum gyanánt vizet használtunk. A víznek mind dielektromos permeabilitása, mind pedig a veszteségi szöge nagy, ezért a víz dielektromos tulajdonságának vizsgálata során a mérés összes problémáival találkozunk. A [2] irodalmi adatok alapján összeállított 1. táblázat a víz komplex dielektromos permeabilitását adja meg 25 °C hőmérsékleten, különböző frekvenciákon.



A módszer alkalmazhatóságának elbírálásához számítsuk ki példa gyanánt, hogy 9500 MHz frekvencián milyen értékek mérésére kell felkészülni.

1. TÁBLÁZAT

	3000 MHz	9500 MHz	24 000 MHz
$\varepsilon$	77	44	35
$\operatorname{tg} \delta$	0,15	0,45	0,06
$-4\pi \frac{\sigma}{\omega}$	12	20	2

A mérést a 8200–12.470 MHz frekvenciasávra ajánlott  $22 \times 10$  mm névleges méretű tápvonalban végezve az 1. táblázatban közölt értékre és környezetére (19) alapján a következő mérendő mennyiségeket kapjuk:

2. TÁBLÁZAT

$-4\pi \frac{\sigma}{\omega}$	20	21
$\varepsilon = 44$	10,02 0,154	10,14 0,175
$\varepsilon = 43$	9,94 0,160	10,00 0,166

3. TÁBLÁZAT

$-4\pi \frac{\sigma}{\omega}$	20	21
$\varepsilon = 44$		+1,2 % +13,6 %
$\varepsilon = 43$	-0,6 % +3,9 %	-0,2 % +7,8 %

A 2. táblázat egyes rovataiban az állóhullámarány értéke és alatta a térerő-minimum helyzete milliméterekben van megadva. A környezeti értékek százalékos eltérését a 3. táblázat adja meg.

A fenti számszerű példából, ill. a táblázatokból látható, hogy ha egymáshoz közel eső  $\varepsilon$  és  $4\pi \frac{\sigma}{\omega}$  értékeket óhajtunk megkülönböztetni, úgy a mérés pontossága iránt igen komoly követelmények lépnek fel.

Vizsgáljuk meg, hogy a gyakorlatban milyen lehetőségek vannak a szükséges pontosság biztosítására, főként a véletlen jellegű hibákat tekintetbe véve.

A 10 körüli állóhullámarány nagy értéknek számít; különösen, ha figyelembe vesszük, hogy az állóhullámarány detektora közel kvadratikusan jellegzőgörbével rendelkezik. Ezért az állóhullámarány mérésénél olyan módszert kell alkalmazni, amely mellett a detektor amplitúdó-jellegzőgörbéjének szabálytalansága nem játszik szerepet. Az állóhullámaránynak fenti követelményt kielégítő mérési módszere a következő lépésekből áll.

— Az állóhullámaránymérő szondáját a térerősség minimumába állítjuk.

— A klisztron-generátor teljesítményét úgy szabályozzuk, hogy az állóhullámaránymérő indikátorműszerén egy tetszőlegesen választott, de meghatározott kitérés jelenjen meg.



— Valamilyen megbízható módszerrel (teljesítménymérés, precíziós csillapító közbeiktatása stb.) megállapítjuk az állóhullámaránymérő műszerének a kétszeres teljesítményszinthez tartozó kitérését.

— Visszaállítjuk az eredeti teljesítményszintet és a teljesítménymérő szondáját a térerő-minimumtól jobbra és balra addig mozdítjuk ki, amíg a kétszeres teljesítménynek megfelelő kitérést meg nem kapjuk az állóhullámaránymérő műszerén.

Figyelembe véve, hogy a térerősség és a teljesítmény között az összefüggés négyzetes, az állóhullámarány értékét (14)-ből kiindulva a következő összefüggés segítségével határozhatjuk meg:

$$h-1 = \frac{2(\sqrt{2}-1)}{1-\cos \gamma_1(z_2-z_1)}, \quad (21)$$

ahol  $z_2$  és  $z_1$  a kétszeres teljesítménynek ( $\sqrt{2}$ -szeres térerősségnek) megfelelő szonda helyzetek, a térerő-minimum két oldalán. Numerikus példánkban  $z_2-z_1$  értékére 0,646 mm értéket kapunk. *A mérés pontosságát tehát gyakorlatilag a távolságmérés pontossága határozza meg.* Ennek alapján a véletlen jellegű hibát az állóhullámaránymérésben 2%-ra, a térerő-minimum helyzetének meghatározásában 10%-ra

becsülhetjük. E közben a térerő-minimum helyzetének célszerű  $\frac{z_2+z_1}{2}$ -et tekinteni,

tekintve, hogy ezek meghatározásakor az állóhullámaránymérő műszer kitérése „meredeken” változik a szonda mozgásakor, míg  $z_0$  meghatározásakor — lévén ezen pontban a  $\partial E_x / \partial z_z = 0$  — az állóhullámaránymérő műszere „érzéketlen” a szonda mozgására. A szóban forgó dielektromos permeabilitás mellett a keresett mennyiségek véletlen jellegű hibáját 5–10%-ra tehetjük. A szisztematikus hiba ennél is nagyobb. Ennek eredete: maguknak a mérőműszereknek a hibája, továbbá számítási hibák (mint amilyenek az itt figyelembe nem vett tápvonal-csillapítás), a szonda által keltett reflexió stb.

Megjegyzendő, hogy a reflexiós módszer azon gyakran alkalmazott változata, amikor a mérendő dielektrikummal töltött szakasz mögött mozgatható rövidzárt helyeznek el és mérik a rövidzár mozgásának hatását az állóhullámarányra, a jelen esetben nem alkalmazható, mert a vizsgált szakasz nagy vesztesége, illetve reflexiója miatt a rövidzár „nem látszik át” a mérendő dielektrikummal töltött szakaszon. Éppen ez jogosít fel bennünket arra, hogy a mérendő dielektrikummal töltött szakaszt végtelennek tekintsük, ha az már néhány centiméternél hosszabb.

Saját,  $\sim 20^\circ\text{C}$ -on végzett tájékoztató méréseink szerint 9000 MHz frekvencián,  $22 \times 10$  mm névleges méretű tápvonalban az állóhullámarány  $h=12,7$  a térerősség-minimum helyzetének eltolódása  $z_0=0,228$  mm volt, ami  $\vartheta=48,3-i35,7$  értékű dielektromos permeabilitásnak felel meg. Az idézett irodalomtól való eltérés abból is ered, hogy a vizsgált víz hőfokában, és az alkalmazott frekvenciában is eltérés volt. Megjegyezzük egyébként, hogy egy másik szerző [3] a víz dielektromos permeabilitására  $\vartheta=55,7-i31,1$  értéket kapott 10 000 MHz frekvencián, ami arra mutat, hogy különböző szerzők adatai között az alkalmazott módszer függvényében igen nagy eltérések mutatkoznak.

Hasonló módszerrel elemezve azt az esetet, amikor a mikrohullámú vezető-képesség a víznél egy nagyságrenddel kisebb, a kapott eredmény hibaszázaléka is jóval kisebb, mintegy 3–5%. A reflexiós módszer tehát a víznél kevésbé poláris anyagok dielektromos sajátságainak vizsgálatára alkalmazható, az elektrolitolda-



tokra azonban már nem, mert ezek mikrohullámú vezetőképességének értéke még a vízenél is jóval nagyobb és ebben az esetben a mérés e módszerrel már nem is lehetne kivitelezhető, mert a minimum eltolódása oly kicsi lenne, hogy az már nem is lenne észlelhető. Nagy dielektromos veszteségű oldatok esetében a módszer csak arra alkalmas, hogy a megfelelő értékek koncentrációfüggésének változására, ill. irányára kvalitatív képet adjon.

Figyelembe véve most már a reflexiós módszerrel kapcsolatos vizsgálódásaink eredményeit célunk eléréséhez, elektrolitoldatok dielektromos sajátságai koncentrációfüggésének apparatíve is és számolás szempontjából is minél egyszerűbb és ugyanakkor minél pontosabb tanulmányozásához, újabb módszerhez — az áteresztő módszerhez — kell folyamodnunk.

### Az áteresztő módszer

Az áteresztő módszer szintén a gyakran használt mérési eljárások közé tartozik. Lényege az, hogy a vizsgált dielektrikummal töltött tápvonalszakasz mögött mérjük a mikrohullámú teljesítményt, illetve az elektromos térerősség nagyságát és fázisát. A pontos fázisméréssel kapcsolatos apparatív nehézségek miatt azt fogjuk megvizsgálni, hogy lehetséges-e az áteresztő módszernek olyan változata, amely a matematikai analízis és méréstechnika szempontjából egyszerűen kivitelezhető.

A megvizsgálandó mérési elrendezés elvi vázlata a 3. ábrán van feltüntetve.

A 3. ábrán az 1. szakasz a bemeneti szakasz, 2. szakasz a mintadarab, 3. szakasz pedig a mérőszakasz. Az egyes szakaszokra vonatkozó mennyiségeket a fenti számoknak megfelelő indexxel fogjuk ellátni.

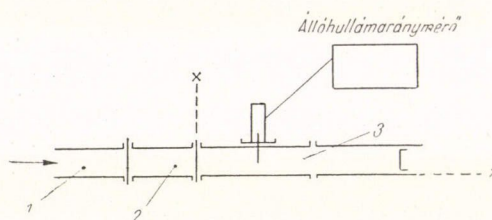
A mérés folyamata a következő lépésekből áll:

- a mintadarab közbeiktatása nélkül mérjük a klisztrongenerátor által keltett térerősséget,
- a mintadarab közbeiktatása után a rövidzárt félhullámhosszúságra állítva be, meghatározzuk a beeső hullám amplitúdóját a mintadarab mögött,
- a rövidrezárt negyedhullámhosszúságra állítva be, meghatározzuk a beeső hullám amplitúdóját a mintadarab mögött.

Az elektromos és mágneses térerőkomponenseket ugyanolyan kifejezések írják le, mint ahogy azt előző módszernél ismertettük. Az első és második szakasz határán a

$$E_{x1}(z = -d) = E_{x2}(z = -d) \quad (21)$$

$$H_{y1}(z = -d) = H_{y2}(z = -d) \quad (22)$$



3. ábra

határfeltételeket kifejező összefüggésekből következőleg a következő egyenleteket nyerjük

$$E_1 + e^{i\gamma_1 d} + E_1 - e^{-i\gamma_1 d} = E_2 + e^{i\gamma_2 d} + E_2 - e^{-i\gamma_2 d} \quad (23)$$

$$\gamma_1 (E_1 + e^{i\gamma_1 d} - E_1 - e^{-i\gamma_1 d}) = \gamma_2 (E_2 + e^{i\gamma_2 d} - E_2 - e^{-i\gamma_2 d}) \quad (24)$$

A második és harmadik szakasz határán viszont a

$$E_{x2}(z=0) = E_{x3}(z=0) \quad (25)$$

$$H_{y2}(z=0) = H_{y3}(z=0) \quad (26)$$

határfeltételek figyelembevételével a következő egyenletekhez jutunk:

$$E_{2+} + E_{2-} = E_{3+} + E_{3-} \quad (27)$$

$$\gamma_2(E_{2+} - E_{2-}) = \gamma_1(E_{3+} - E_{3-}) \quad (28)$$

mivel  $\gamma_1 = \gamma_3$ .

Ha a rövidzár ettől a felülettől félhullámnyi távolságra van, úgy  $E_{3+} = -E_{3-}$  és a fenti egyenletekből a következő összefüggést kapjuk:

$$2 \frac{E_{1+}}{E_{3+}} \gamma_2 d e^{i\gamma_1 d} = (\gamma_1 d + \gamma_2 d) e^{i\gamma_2 d} + (\gamma_2 d - \gamma_1 d) e^{-i\gamma_2 d}. \quad (29)$$

Ha a rövidzár a  $z=0$  felülettől negyedhullámú távolságra van, úgy  $E_{3+} = E_{3-}$  és a fenti egyenletekből viszont a

$$2 \frac{E_{1+}}{E_{3+}} \gamma_1 d e^{i\gamma_1 d} = (\gamma_1 d + \gamma_2 d) e^{i\gamma_2 d} + (\gamma_1 d - \gamma_2 d) e^{-i\gamma_2 d} \quad (30)$$

egyenlethez jutunk.

A (29), (30) egyenlettel kapcsolatban megfelelő közelítéseket vezethetünk be: ha a mintadarab vastagságát eléggé nagynak választjuk, úgy a második tagot elhanyagolhatjuk. Úgyszintén figyelembe kell venni, hogy  $E_{3+}$ -nak csak abszolút értékét mérjük, s így a két egyenletnek is csak abszolút értékét kell venni. Ennek megfelelően a gyakorlati használatra ajánlható két egyenletrendszer:

$$\left| \frac{E'_{3+}}{E''_{3+}} \right| \cong \left| \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right| \quad (31)$$

$$2 \left| \frac{E_{1+}}{E''_{3+}} \right| \cong \left| 1 + \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right| |e^{i\gamma_2 d}| \quad (32)$$

A 4. táblázat — hasonlóan a reflexiós módszer esetében alkalmazott táblázathoz — a 9500 MHz frekvencián  $22 \times 10$  mm névleges tápvonalban a várható mérési értékeket adja meg a víz dielektromos permeabilitása környezetében 1 cm

hosszú mintadarab esetében. A táblázatban a felső számok az  $\left| \frac{E'_{3+}}{E''_{3+}} \right|$  értékek, az

alsó számok pedig az  $\left| \frac{E_{1+}}{E''_{3+}} \right|$  értékek.



Ugyanezt még szemléletesebben százalékos táblázatba foglalva mutatja be az 5. táblázat.

4. TÁBLÁZAT

$-4\pi \frac{\sigma}{\omega}$	20	21
$\varepsilon = 44$	9,79	9,83
	74,6	87,0
$\varepsilon = 43$	9,69	9,74
	77,0	89,9

5. TÁBLÁZAT

$-4\pi \frac{\sigma}{\omega}$	20	21
$\varepsilon = 44$		+0,4 %
		+18,0 %
$\varepsilon = 43$	-1,0 %	-0,5 %
	+3,2 %	+20,5 %

A mérés pontosságát tehát e módszer esetén a mintadarab által a mérőszakaszba áteresztett mikrohullámú teljesítmény, illetve az ezzel kapcsolatos térerősség pontosságának mérése szabja meg. Amennyiben a térerősségmérés detektor segítségével történik, úgy a detektor amplitúdó-jelleggörbéjének megállapítása (teljesítménymérés, kalibrált csillapító stb. segítségével) feltétlenül szükséges. Az ilyen jellegű mérések pontossága 3–4%. A 3. táblázat felső sorainak mérésében azonban ez a pontosság nem kielégítő, az alsó sor mérésében viszont az elérhető pontosság már kielégítő. Köszönhető ez annak, hogy a második sor számítása a (32) egyenleten alapszik, amelyben exponenciális tényező fordul elő. Ezért ezen módszer segítségével az elektromos vezetőképességben bekövetkező változás már jól észlelhető és mérhető. Ugyanez azonban nem mondható el a dielektromos permeabilitás mérésére is.

Az áteresztő módszer alkalmazásánál a mintadarab nagy reflexiója és nagy csillapítása következtében a beadott jelnek csak kis része jut a mérőszakaszba. A birtokunkban levő berendezések ez okból nem tették lehetővé számításaink kísérleti igazolását. Ha azonban rendelkezésre állnak a szükséges elemek — amelyek egyébként a mikrohullámú méréstechnikában szokásosak —, a szükséges mérések elvégzése nem jelenthet nehézséget.

# IRODALOM

- [1] C. G. Montgomery, *Technic of Microwave Measurements*. McGraw-Hill. N. Y. — London. 1947.
- [2] Theodore Moreno, *Microwave Transmission Design Data*. McGraw-Hill. N. Y. — London. 1948.
- Landolt—Börnstein, *Zahlenwerte und Funktionen*. 6. Auflage, II. Band. 6. Teil. 743 old. 1959.
- [3] В. К. Ткач, Л. Д. Степин, В. Б. Казанский; Радиотехн. и электр. 5, 2009, 1960.





# RÁCSHIBÁK ELEKTROMOS ELLENÁLLÁSA FÉMEKBEN

KOVÁCS ISTVÁN és BALÁZS JÁNOS\*

ELTE, Kísérleti Fizikai Tanszék

## Bevezetés

A fémek elektromos ellenállásának mérése egyre szélesebb területen nyer alkalmazást a modern szilárdtestfizikában. Az ellenállás változásából az anyag sok fizikai (elektromos, mágneses, mechanikai stb.) tulajdonságára lehet következtetni. Különösen előnyössé teszi az ilyen mérések alkalmazását az a tény, hogy az ellenállás megváltozása valamilyen külső behatásnak kitett fémnél általában nagy pontossággal mérhető. A külső behatás módjától függően a mérések célja lényegesen különböző lehet. Jelen dolgozat a polikristályos fémek képlékeny alakításakor fellépő ellenállásváltozással foglalkozik.

Külső behatástól mentes (hibátlan) fémekben nem túl alacsony hőmérsékleten az ellenállás legnagyobb részét a vezetési elektronoknak a termikus mozgásban levő ionokon való szóródása okozza. Ennek az ellenállásnak a nagysága arányos az ionok elmozdulásnégyzetének átlagával [1]:

$$\varrho_i \approx \frac{\hbar^2}{k} \frac{T}{M\theta^2},$$

ahol  $T$  az abszolút,  $\theta$  a Debye hőmérséklet,  $M$  egy atom tömege,  $\hbar$  és  $k$  a Planck, illetve Boltzmann-állandók.

Ha egy fémekben rácshibák (vakancia, intersticiális atom, diszlokáció) keletkeznek, a fém ellenállása megnövekszik. Ennek oka pl. egy vakancia esetén a következő. A vakancia keletkezése a rács adott pontjában egy pozitív ion megszűnésével jár. Az így fellépő „negatív” lyuk hatását az elektrongáz állapotának megváltozása csak részben kompenzálja ki, ezért a vezetési elektronok számára a vakancia nullától különböző eredő szórópotenciált jelent. A szórás eredményeként a vakancia jól definiált ellenállásváltozást okoz. Hasonlóképpen bármely más rácshiba által okozott rendellenességek az ellenállás növekedését eredményezik. Az eredő ellenállás meghatározásánál általában feltételezik a Matthiessen-szabály érvényességét, mely szerint

$$\varrho = \varrho_i(T) + \Delta\varrho, \quad (2)$$

ahol  $\varrho_i(T)$  a hibátlan anyag hőmérsékleti hatásából származó,  $\Delta\varrho$  pedig a hibák által okozott fajlagos ellenállás. A következőkben röviden és csak kvalitatíve tekintjük a különböző hibákra vonatkozó vizsgálatok eredményeit.

\* Ötödéves fizikus hallgató.



### Rácshibák fajlagos ellenállása

A rács hibák elektromos ellenállásának számítása eddig csak nagyon részleges eredményekkel járt. Az elméleti és kísérleti adatok elég jól egyeznek vakanciákra, intersticiális atomok és különösen diszlokációk esetén azonban az egyezés még távolról sem kielégítő.

A vakanciák okozta többletellenállásra *Jongenburger* végzett számítást ezüst, arany és réz esetén [2]. A többletellenállást az elektronoknak a vakancia üregén való szóródása és a vakancia körüli atomok elmozdulása okozza. Ez utóbbi hatás *Jongenburger* számításai szerint elhanyagolható az előbbi mellett. Az említett fémekben a vakanciák ellenállására eredményül 1,5, illetve 1,3 mikrohm.cm/atom-százalék-ot kapott.

Az intersticiális atomok által okozott többletellenállást *Dexter*, *Huntington* és *Jongenburger* számolták [3]. A többletellenállás most is két tényezőre, az elektronoknak az intersticiális atomokon való közvetlen szóródására és a környező rács deformációja által okozott szórásra vezethető vissza. A rács deformációból származó hatás most jelentős járulékot ad, ezért az intersticiális atomok ellenállása kb. 5 mikrohm.cm/at%.

A diszlokációk okozta többletellenállás számítása lényegesen nehezebb problémát jelent. A különböző szórási mechanizmusok feltételezésével végzett számítások jelentősen eltérnek a kísérleti eredményektől. A diszlokációk által okozott többletellenállás három hatásra vezethető vissza:

1. A diszlokáció közelében fellépő rácsdilatáció hatása. Ez a hatás a térfogati dilatációval arányos szórópotenciállal vehető figyelembe. *Hunter* és *Nabarro* [4], valamint *Seeger* és *Stehle* [5] végeztek ilyen számításokat, s a megfigyelt értéknél ötvenszer kisebbet kaptak. Az eltérés oka kereshető abban, hogy a dilatációs szórás zöme a diszlokáció magjától ered, ahol a térfogati dilatáció kiszámítása megbízhatatlanná válik az elsőrendű rugalmasságtan alkalmazása miatt. Ezért *Seeger* és *Bross* [6] a térfogati dilatációt nemlineáris rugalmas egyenletek alapján számította ki. Az ellenállásra perturbációszámítással kapott eredményük azonban nem megnyugtató, mert éldiszlokációra a feszültségtér sugarának függvényében logaritmikusan divergáló kifejezést kaptak. *Nabarro* és *Ziman* vizsgálatai szerint ez az eredmény a perturbáció számítás helytelen alkalmazásának következménye [7]. Megmutatták, hogy a korábbi dolgozatokban helyesen alkalmazták a perturbációszámítást a diszlokáció üregén kívüli dilatációs szórás kiszámítására.

A diszlokáció üregétől származó hatás becslésére *Harrison* [8] egy atomtávolság hosszúságú diszlokációt egy atomtérfogat nagyságú üreges hengerrel helyettesített. Ennek szórását rézre kiszámította és a hosszegységnyi diszlokáció üregének ellenállására  $5 \cdot 10^{-20}$  ohm.cm<sup>3</sup>-t kapott. A kísérleti tapasztalatok szerint azonban a hosszegységnyi diszlokáció által okozott fajlagos ellenállás növekedés felületcentrált köbös fémekben néhányszor  $10^{-19}$  ohm.cm<sup>3</sup> nagyságrendű. Ezért a megfigyelt ellenállás növekedést a diszlokáció üregének szórásával nem tudjuk magyarázni.

2. Rétegződési hibák szórása. *Cotterill* [9] 1961-ben aranyra kísérletileg  $1,8 \pm 0,3 \cdot 10^{-13}$  ohm.cm<sup>3</sup>-t kapott egységnyi területű rétegződési hiba fajlagos ellenállására. Ez jól egyezett *Howie* [10] számításaival. A tiszta fémekre vonatkozó kísérleti tapasztalatok azonban a rétegződési hibákon való szórással sem magyarázhatók, mivel a rétegződési hiba tartományának a lehetséges maximális szélesség



négyszeresét kellene elérnie a kísérletekkel való egyezéshez. Bizonyos ötvözeteknél (Cu-Zn, Cu-Al) a rétegződési hibák járuléka domináló lehet.

3. A kristályrács nyírási deformációja miatt fellépő szórás. A hibákat tartalmazó kristály atomjai nyugalmi helyzetükből kimozdulnak. A diszlokáció körül ezek az elmozdulások a helyvel változnak. A diszlokáció üregéhez közel a torzulás olyan nagy, hogy az atomi rendezetlenség a folyadékét közelíti meg. Ez a tartomány okozza az 1. pont alatt tárgyalt dilatációs szórás legnagyobb részét. Láttuk azonban, hogy sem a dilatációs szórás, sem a rétegződési hibák szórása nem ad egyezést a kísérleti tapasztalattal, ezért várhatjuk, hogy a hibás kristály atomjainak nyírási elmozdulásai is jelentősen növelik az ellenállást. Ezen járulék becslésére *Basinski* és munkatársai [11] dolgoztak ki egy egyszerű modellt, amellyel kapott eredmények elég jól egyeznek a tapasztalattal. A rács hibák által okozott elmozdulásokat úgy tekintették, mintha egy „befagyasztott” hőmozgásból származnának, amelyre a tényleges termikus rezgés szuperponálódik. E modell feltételezésével nagyon egyszerű összefüggés nyerhető a diszlokációk által okozott fajlagos ellenállás és az ideális kristály ellenállása között. Tekintsünk egy  $b$  rácsállandójú felületcentrált köbös kristályt, amelyben  $N$  számú  $b$  Burgers vektorú diszlokáció van négyzetcentiméterenként. Legyen az atomtérfogat  $V$ , akkor a hosszegységnyi diszlokációvonal mentén fekvő atomok száma arányos  $NV^{2/3}$ -nal. Ha feltételezzük, hogy a „befagyasztott” hőmozgásnál is az ellenállás arányos az elmozdulásnégyzet átlagával ( $NV^{2/3}b^2$ ), akkor egy atomtérfogat nagyságú kocka diszlokációtól származó ellenállására a

$$\Delta R_d = V^{-\frac{1}{3}} \cdot \varrho_d \approx NV^{2/3} b^2$$

kifejezést kapjuk. Az atomtérfogatnyi kocka termikus hatásokból származó ellenállása:

$$\Delta R_i = V^{-\frac{1}{3}} \cdot \varrho_i \approx \frac{\hbar^2 T}{kM\Theta^2}.$$

E két kifejezés összevetéséből a hosszegységnyi diszlokációból származó fajlagos ellenállásváltozás

$$\frac{\Delta \varrho_d}{N} = \frac{\alpha b^2 V^{2/3} M \Theta^2}{T} \varrho_i(T).$$

1. TÁBLÁZAT

Anyag	$\Delta \varrho_d / N (10^{-19} \Omega \cdot \text{cm})$			Vakanciák ellenállása ( $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm/at} \%$ )	$n(10^9)$
	Elméleti adatok	Kísérleti adatok 78 K°-on			
Cu	2,0	3,7 [17] 2,7 [21]	4,1	1,5 [22]	1,6
Ag	2,2	3,4 [21]	3,1	1,6 [23]	1,2
Au	2,8	3,4 [21]	5,3	1,7 [23]	1,9
Al	4,7	3,3 [21]	3,6	2,2 [24]	1,0
Rh	—	—	36	—	—

Ha feltételezzük, hogy az  $\alpha$  állandó a különböző fémek esetén nem változik jelentősen és rézre elfogadjuk a kísérletileg kapott  $\Delta\varrho_d/N$  értéket, akkor  $\alpha$  meghatározható. Ezzel mód nyílik a különböző fémekben a diszlokációk által okozott fajlagos ellenállás összehasonlítására. A  $T = \Theta$  helyettesítéskor kapott eredményeket az 1. táblázat első oszlopa mutatja.

### Diszlokációk által okozott ellenállásnövekedés kísérleti meghatározása

A diszlokációk „fajlagos ellenállásának” meghatározására Au, Ag és Cu ellenállásváltozását vizsgáltuk 77 K°-on egyidejű nyújtás és csavarás függvényében. Eredményeink azt mutatják, hogy az ellenállásváltozás nem függ a deformáció módjától, csak a deformáció során kialakuló összes nyírástól, amely a következő kifejezéssel adható meg [12]:

$$\gamma = \frac{2}{3} \frac{r_0 \Theta}{l_0} + 3 \frac{\Delta l}{l_0}, \quad (1)$$

ahol

$$\Theta = \int_0^{\vartheta} \frac{d\vartheta'}{\left[1 + \frac{\Delta l(\vartheta')}{l_0}\right]^{3/2}}.$$

$r_0$  és  $l_0$  a huzal kezdeti sugarát, illetve hosszát,  $\vartheta$  az elcsavarás szögét,  $\Delta l$  a  $\vartheta$  szöghöz tartozó megnyúlást jelenti. Az ellenállásváltozás az (1) alatti összes nyírás függvényében az 1. ábrán látható.

Azonos minták és azonos körülmények esetén az ellenállásváltozás és a deformáció mértéke között egyértelmű  $\Delta\varrho = \varphi(\gamma)$  összefüggés van. Ez az összefüggés azonban nem tekinthető törvénynek, mert a  $\varphi(\gamma)$  függvény alakja függ a minta kezdeti állapotától, továbbá a mérés körülményeitől [13].

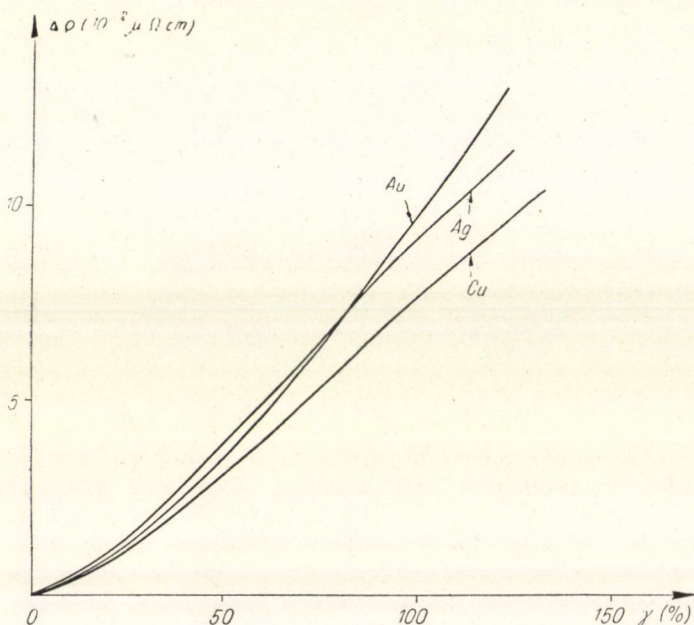
Az anyagra és a deformáció során általában kialakuló folyamatokra jellemző összefüggést csak akkor kaphatunk, ha az ellenállásváltozást olyan paraméterrel hozzuk kapcsolatba, amelynek mérhető értéke a minta pillanatnyi állapotára jellemző.

Az alakítási keményedés mechanizmusán keresztül a pillanatnyi folyáshatár ( $\sigma$ ) egyértelmű összefüggésben van a testben kialakult hibastruktúrával. A folyási feszültség ezért mindig a pillanatnyi hibastruktúrát jellemzi a minta előéletétől függetlenül. A folyási feszültség és az ellenállásváltozás közötti összefüggés tehát lényegesen jellemzőbb kell legyen a vizsgált anyagra, mint a  $\Delta\varrho = \varphi(\gamma)$  kapcsolat.

A 2. ábrán megadtuk Au, Ag és Cu esetén az ellenállásváltozás és folyási feszültség közötti összefüggést. Látható, hogy Au és Ag esetén az ellenállásváltozás négyzetgyöke és a folyási feszültség között egyértelmű, lineáris összefüggés van. A linearitás független a minta előzetes hőkezelésétől [13], továbbá legalábbis ezüst esetén a deformáció hőmérsékletétől is [14]. A vizsgált rézmintákon az előző anyagokhoz képest eltérés adódott. A linearitás megmaradt ugyan, de a görbe most két különböző iránytangensű egyenes szakaszból áll. Ez a tény valószínűleg a réz szennyezettségéből származik. A vizsgált Au és Ag minták tisztasága 99,99% volt,



a réz tisztasága azonban nem ismeretes. Az aranyra és ezüstre kapott eredmény elegendően tiszta fémekre univerzális összefüggésnek látszik, amit más, az irodalomban elérhető mérések ilyen kiértékelése is alátámaszt. *Pistorius* végzett 77 K°-on ellenállásváltozás és folyási feszültség méréseket különböző alumínium mintákon [15]. Mérési adatai alapján az ellenállásváltozás és folyási feszültség közötti kap-



1. ábra. Arany, ezüst és réz elektromos ellenállásváltozása a deformáció függvényében

csolatra a 3. ábrán látható görbéket kaptuk. Ezek teljes mértékben megerősítik az előbbi megállapításokat. Látható, hogy a nagyobb tisztaságú anyag esetén egyetlen egyenes adódik, amelynek helyzete csak kevésbé függ az előzetes hőkezeléstől (*a, b* görbék). A kevésbé tiszta anyag esetén a rézhez hasonló eredmény adódik (*c, d* görbék). Érdekes azonban, hogy az egyik egyenes szakaszból a másikba való átmenet kb. ugyanazon feszültségnél következik be ( $\sim 7,5 \text{ kg/mm}^2$ ). Ez érthetővé teszi azt a tényt, hogy a hőkezeletlen anyagon az első egyenes szakasz nem figyelhető meg (*e* görbe), mert a nagy keménység miatt a mérés csak ezen feszültség fölött kezdődött. A tiszta anyagokra vonatkozó megállapításokat erősíti meg még *van Kuijk* rhodiumon végzett mérése is [16]. Adatainak felhasználásával a feszültség—ellenállásváltozás görbére szintén egyenest kaptunk.

Ezek a következtetések teljes egyezésben vannak *Blewitt* és munkatársai réz egykristályra vonatkozó [17], valamint *Basinski* és munkatársai által vasra és káliumra közölt eredményeivel [11].

A felsorolt kísérleti tények tehát azt mutatják, hogy az ellenállásváltozás—feszültség összefüggés univerzális jellegű elég nagy tisztaságú anyagokra. Ezért a

megvizsgált esetek alapján azt mondhatjuk, hogy elegendően tiszta fém ellenállás-változása és a folyási feszültség közötti összefüggés anyagi minőségétől függetlenül a következő alakú

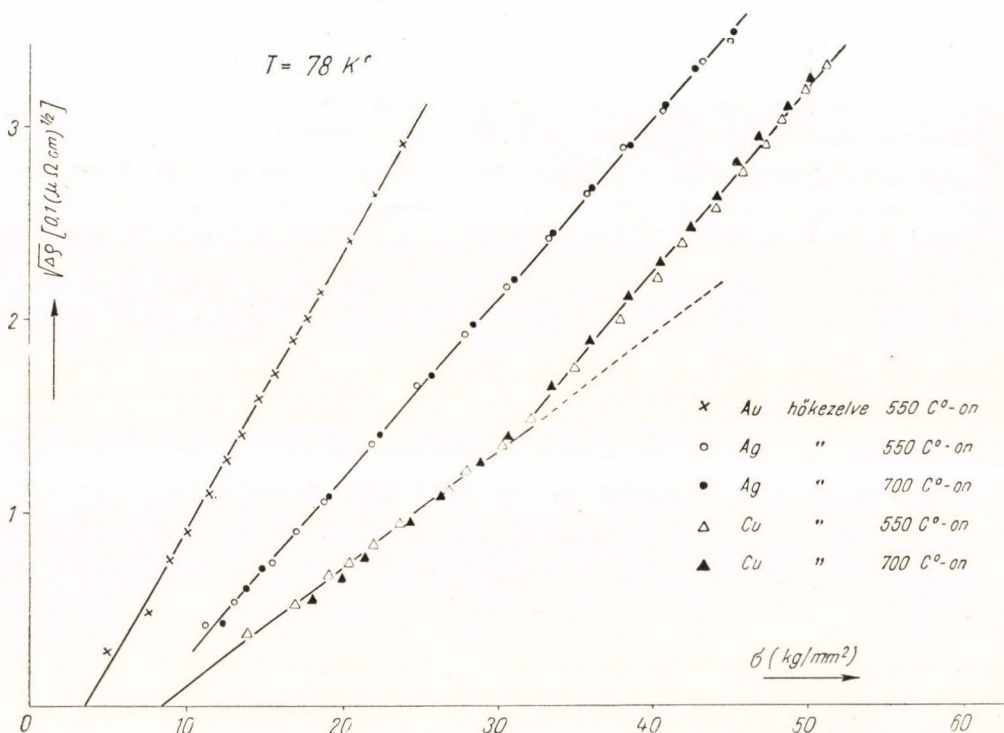
$$\Delta \varrho = \alpha(\sigma - \sigma_0)^2. \quad (2)$$

$\alpha$  az anyagi minőségre és a deformáció hőmérsékletére jellemző paraméter.

Elektronmikroszkópos vizsgálatok azt mutatják [18], hogy a fémek egy sorozatára a folyási feszültség a diszlokációsűrűséggel a következőképpen fejezhető ki

$$\sigma = \mu b \sqrt{N}, \quad (3)$$

ahol  $\mu$  a nyírási modulusz,  $b$  a Burgers vektor abszolút értéke. Bizonyos fémekre hasonló kifejezés érvényes, csak a folyási feszültség helyett a kezdeti folyáshatár növekményét kell figyelembe vennünk ( $\sigma - \sigma_0$ ) [19]. Feltételezve, hogy ez utóbbi



2. ábra. Összefüggés az elektromos ellenállásváltozás és folyási feszültség között különböző anyagú és előzetes hőkezelésű mintákra

az általános eset és a (3) alatti formulákban a kezdeti folyáshatár a nagyon kicsiny kezdeti diszlokációkoncentráció miatt nem lép fel ( $\sigma_0 \ll \sigma$ ), a folyási feszültség és a diszlokáció koncentráció között általában a következő összefüggést írhatjuk fel,

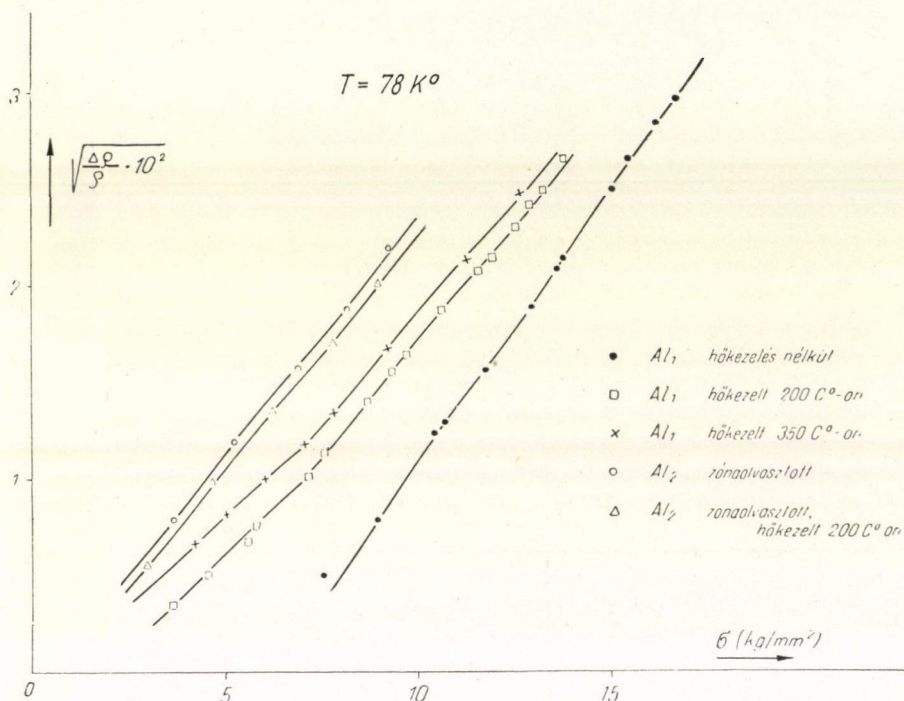
$$\sigma - \sigma_0 = \mu b \sqrt{N}.$$



Felhasználva azt a kísérleti tapasztalatot, hogy az összes ellenállásváltozásnak közelítőleg a fele származik diszlokációktól, a hosszegységnyi diszlokáció ellenállására a következő kifejezést kapjuk

$$\frac{\Delta \rho_d}{N} = \frac{1}{2} \alpha \mu^2 b^2.$$

$\alpha$  értéke a mérésekből a 2., 3. ábra alapján meghatározható.  $\mu$  és  $b$  irodalmi adatainak (2. Táblázat) felhasználásával kiszámítható a hosszegységnyi diszlokáció ellen-



3. ábra. Összefüggés az elektromos ellenállásváltozás és folyási feszültség között különböző tisztaságú és előzetes hőkezelésű alumínium mintákra. (Az ellenállásváltozás és folyási feszültség adatokat a [15] dolgozatból vettük)

állása a vizsgált fémekben. A  $\Delta \rho_d$ -re kapott eredményeket az 1. táblázat harmadik oszlopában foglaltuk össze. Ezek jól egyeznek Basinski és munkatársai által közölt értékekkel. A táblázat második és negyedik oszlopának adatait a jelzett dolgozatok alapján adtuk meg.

Kísérleti és elméleti eredmények azt mutatják, hogy a plasztikus deformáció során keletkező diszlokációk és ponthibák száma arányos egymással [14, 20].

Ha a ponthibáktól eredő ellenállásnövekedést csak vakanciáknak tulajdonítjuk (ami természetesen durva képet jelent), könnyen megbecsülhetjük azon va-

kanciák számát, amelyek a deformáció során a hosszegységnyi diszlokációval együtt keletkeznek ( $n$ ).

A vakanciák ellenállására vonatkozó irodalmi adatok felhasználásával kapott  $n$  értékeket az 1. táblázat tartalmazza. Ezek szintén jól egyeznek az irodalomban ismert kísérleti és elméleti adatokkal [20].

2. TÁBLÁZAT

Anyag	$\alpha \left[ \frac{10^{-10} \Omega \text{cm}}{(\text{kg/mm}^2)^2} \right]$	$\mu \left[ \frac{10^{11} \text{dyn}}{\text{cm}^2} \right]$	$b(10^{-8} \text{ cm})$
Cu	0,80	4,0	2,55
Ag	0,83	3,0	2,88
Au	1,95	2,6	2,87
Al	1,21	2,7	2,86
Rh	0,22	15	2,68

Végül köszönetünket fejezzük ki Nagy Elemér professzor úrnak munkánk során nyújtott tanácsaiért.

## IRODALOM

- [1] N. F. Mott and H. Jones, The Theory of the Properties of Metals and Alloys Dover Publications, New York, 1958. p. 244.
- [2] P. Jongenburger, Appl. Sci. Res. B3, 237, 1953.
- [3] D. L. Dexter, Phys. Rev. 87, 768, 1952.  
H. B. Huntington, Phys. Rev. 91, 1092, 1053.  
P. Jongenburger, Nature 175, 545, 1955.
- [4] G. S. Hunter and F. R. N. Nabarro, Proc. Roy. Soc. A220, 542, 1953.
- [5] A. Seeger und H. Stehle: Z. Phys. 146, 242, 1956.
- [6] A. Seeger und H. Bross, Z. Naturf. 15a, 663, 1960.
- [7] F. R. N. Nabarro and J. M. Ziman, Proc. Phys. Soc. 78, 1512, 1961.
- [8] W. A. Harrison, J. Phys. Chem. Solids 5, 44, 1958.
- [9] R. M. J. Cotterill, Phil. Mag. 6, 1351, 1961.
- [10] A. Howie, Phil. Mag. 5, 251, 1960.
- [11] Z. S. Basinski, J. S. Dugdale and A. Howie: Phil. Mag. 8, 1989, 1963.
- [12] I. Kovács and P. Feltham, Phys. Stat. Sol. 3, 2379, 1963.
- [13] I. Kovács and E. Nagy, Phys. Stat. Sol.
- [14] I. Kovács, E. Nagy and P. Feltham, Phil. Mag. 9, 797, 1964.
- [15] C. A. Pistorius, Physica, 27, 149, 1961.
- [16] J. G. M. van Kujik, Physica 30, 398, 1964.
- [17] T. H. Blewitt, R. R. Coltman and K. J. Redman: Report of the Conference on Defects in Crystalline Solids London, 1955, p. 369.
- [18] J. E. Bailey, Phil. Mag. 8, 223, 1963.
- [19] A. S. Keh, Direct Observations of Imperfections in Crystals New York, 1962, p. 213.
- [20] P. Feltham, Phys. Stat. Sol. 6, 235, 1964.
- [21] L. M. Clarebrough, M. E. Hargreaves and M. K. Loretto, Phil. Mag. 6, 807, 1961 és Phil. Mag. 7, 115, 1962.
- [22] R. O. Simmons and R. W. Baluffi, Phys. Rev. 129, 1533, 1963.
- [23] A. Seeger, Radiation Damage in Solids, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1962. p. 101.
- [24] M. Doyama and J. S. Koehler, Phys. Rev. 134, A522, 1964.



# A KVANTUMTÉRELMELET ALAPELVEI ÉS LEGÚJABB EREDMÉNYEI\* I.

## A TÉRELMELET POSZTULÁTUMAI\*\*

PÓCSIK GYÖRGY

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Intézet

Ebben és a következő néhány dolgozatban a térelmélet legújabb eredményeit, köztük a Wightman-féle formulázást, egységes szempontból tárgyaljuk. Fő célunk az, hogy olyan mély fizikai tételekig jussunk el, mint pl. a spin és statisztikai kapcsolata, TPC-tétel, lokális terek Borchers-féle ekvivalencia osztályai, általánosított Haag-tétel, stb. E tételek bizonyításában nagymértékben felhasználhatók a Wightman-függvények különféle (önmagában is nagyon fontos) analitikus tulajdonságai. Ennek megfelelően a sorozat tagozódása a következő: 1. axiómák, 2. Wightman-függvények analitikus tulajdonságai és rekonstrukciós tétel, 3. különféle fizikai alkalmazások. Minthogy aránylag új matematikai fogalmak és tételek alkalmazása válik szükségessé, a megértéshez elengedhetetlen, minimális számú, fizikusok számára nem közismert tételt a Függelékben foglaltuk össze.

### 1. §. Bevezetés

E munka megírásának szükségessége az ELTE, Elméleti Fizikai Intézetében dolgozó kollégákban merült fel először. Valóban, ma általános tendencia az, hogy a térelmélet *Wightman* által is sokat említett „szegény ember féle verzióján” túl jussunk. Ettől a törekvéstől várjuk azt, hogy az elemi részek alapvető fizikai törvényeinek az érvényességi körét, s a belső kapcsolatokat tisztán lássuk. Kétségtelen, hogy az „axiomatika” még nem oldotta meg az elemi részek elméletének fő problémáját, azonban máris sok fizikai kérdésre adott választ. Utóbbiak képezik tárgyunkat.

Jól ismert, hogy a térelméletben a terek leírására bizonyos operátorok szolgálnak, azonban gyakorlati okok miatt csak kevés problémát lehet megoldani vákuumvárható értékekre való hivatkozás nélkül. Éppen ezért, kíváncsiak a téroperátorokra kirótt követelményeket (ezeket tárgyaljuk a jelen dolgozatban) függvények nyelvén megfogalmazni. Ezt a gondolatot a szilárd anyag fizikától a térelméletig termékenyen alkalmazzák. A térelméletben két fő módszer áll rendelkezésre, az egyik *Wightman*-tól származik [1] és alaplmenyisége a téroperátorok szorzatának vákuumértéke (Wightman-függvények), a másik *Lehmann*, *Symanzik* és *Zimmermann* nevéhez fűződik [2] és alaplmenyisége az időrendezett szorzatok vákuumértéke, vagy a retardált függvény. A továbbiakban főként az első módszerrel foglalkozunk. Ennek az az előnye, hogy minden vonatkozásában precízen véghezvihető és a tér rekonstrukciója is bizonyítható. A részecske interpretáció (az aszimptota feltétel) szempontjából azonban túlságosan szűk. Ezért sok fizikai eredményhez csak a Wightman-féle axiómarendszer kibővítésével juthatunk el. Az LSZ-módszerrel fordított a helyzet.

\* E sorozat anyagának jelentős része az ELTE, Elméleti Fizikai Intézetben, a szerző által 1964 és 1965-ben tartott szemináriumokon hangzott el.

\*\* Érkezett 1965. ápr. 8.



A tárgyalásban a lényeges gondolatsort bizonyítjuk, azonban a szélesebb áttekintés kedvéért több tételt röviden is megemlítünk. A dolgozat állításai az eredeti előadásoknak megfelelően *H. Araki* „Wightman Functions, Retarded Functions and Their Analytic Continuations” c. dolgozatához, mint maghoz kapcsolódnak [3] (*R. S. Streater* és *A. S. Wightman* „PTC, Spin and Statistics and All That” c. kiváló könyve [4] csak a közelmúltban jelent meg). A tárgyalás folyamán a térelmélet egyetemi szintű ismeretét tesszük fel.

Ebben a bevezető dolgozatban főként a térelmélet axiómáit tárgyaljuk. Néhány fogalmat és tételt a Hilbert tér operátorairól, ill. a térelméletben használt mérsékelt disztribúciókról a Függelékben gyűjtöttünk össze.

## 2. §. A térelmélet axiómái

A modern térelmélet axiómái a régebbi térelméletben is fellelhető egyes alapelvek matematikailag is pontos alakban való lerögzítése. A régi sémát két ponton kell (legalább) teljessé tenni.

1. Már a legegyszerűbb térelméletben is látszik, hogy a téroperátorokat nem lehet a négyes tér pontjaihoz rendelni, hiszen ekkor a csererelációktól,  $S_F$ ,  $D_F$  függvényektől kezdve sorozatosan szinguláris függvények jelennek meg. De fizikailag is látszik, hogy a négyes tér bizonyos tartományaihoz kell (kellőképpen „kisimított”) operátorokat rendelni. Ezt mutatják pl. *Bohr* és *Rosenfeld* vizsgálatai az elektromágneses tértenzor kis tér-idő tartományon való mérhetőségéről. A kérdés az, hogy milyen függvényekkel végezzük a szétkenést. Minthogy ragaszkodni akarunk a különféle vákuumértékek Fourier-transzformáltjainak létezéséhez és alkalmas viselkedéséhez, (renormálható elméleteknek megfelelően) a próbafüggvényeket az  $\mathcal{S}$  függvényosztályból választjuk. Ekkor a vákuumértékek mérsékelt disztribúciókká válnak (lásd 2. Függelék). Ezzel a kérdéssel részletesen is foglalkozunk majd.

2. Másrésről sok fizikai mennyiség (a megfelelő várható érték) akármilyen nagy értéket is felvehet, ezért a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorok nem korlátosak (lásd 1. Függelék). Ezek a Hilbert-térnek csak egy részén vannak értelmezve. Pl. a kvantummechanikában a legegyszerűbb ilyen operátor a koordináta-operátor.

Mostmár kimondhatjuk alapfeltevéseinket.

### I. Kvantumelmélet posztulátumai

Adott egy szeparábilis  $\mathcal{H}$  Hilbert-tér. A fizikai rendszer állapotait a  $\mathcal{H}$ -ban levő „egységnyi sugarakkal” írjuk le. Egységnyi sugárt alkotnak a  $\mathcal{H}$ -beli azon egységnyi normájú elemek, amelyek egymástól csak egy egységnyi moduluszu komplex számban térnek el. Mint a kvantummechanikában, a mérési eredményeket a skalárszorzatok abszolútérték négyzetei határozzák meg és ezek függetlenek attól, hogy a két sugárból melyik reprezentánst választottuk.

Általában nem minden  $\mathcal{H}$ -beli egységnyi sugár ír le fizikai állapotot.



## II. Speciális relativitás posztulátuma

Mindenekelőtt a következő jelöléseket fixáljuk le.  $M$  jelöli a négyes, Minkowski teret, a skalárszorzat  $(x, y) = x_0 y_0 - x_1 y_1 - x_2 y_2 - x_3 y_3$ .  $L(R)$  a valós, homogén Lorentz transzformációk csoportja.  $\uparrow$  ill.  $\downarrow$  arra utal, hogy a transzformáció az idő-tengely irányát változtatlanul hagyja-e, ill. nem.  $+$  ill.  $-$  esetén a transzformáció determinánsa pozitív, ill. negatív.  $L_+^\uparrow(R)$  a megszorított Lorentz-csoport.  $L(R)$  az  $L_+^\uparrow(R)$ ,  $L_+^\downarrow(R)$ ,  $L_-^\uparrow(R)$ ,  $L_-^\downarrow(R)$  komponensekből áll. Az  $x' = \Lambda x + a$  alakú inhomogén Lorentz transzformációk,  $\Lambda \in L_+^\uparrow(R)$ ,  $a \in M$  az inhomogén megszorított Lorentz csoportot képezik,  $\mathcal{P}_+^\uparrow$ . A szorzásszabály  $(a_1, \Lambda_1)(a_2, \Lambda_2) = (a_1 + \Lambda_1 a_2, \Lambda_1 \Lambda_2)$ .

Posztulátum: a valós, megszorított inhomogén Lorentz csoportnak létezik  $\mathcal{H}$ -n egy folytonos, unitér, nem feltétlenül egyértékű ábrázolása.

Ezzel  $\mathcal{H}$ -n  $U(a, \Lambda)$  unitér operátorokat definiáltunk, melyekre definíció szerint

$$U(a_1, \Lambda_1)U(a_2, \Lambda_2) = U(a_1 + \Lambda_1 a_2, \Lambda_1 \Lambda_2). \quad (1)$$

(Pontosabb jelölésben a  $\Lambda$ -k helyett az  $L_+^\uparrow(R)$ -rel izomorf két dimenziós unimoduláris csoport mátrixait kellene beírni.)

Ez a posztulátum azt mondja, hogy a fizikai állapotoknak  $\mathcal{P}_+^\uparrow$ -beli Lorentz transzformációkor  $U(a, \Lambda)$ -val kell transzformálódniuk.

A posztulátum háttere a következő. A relativisztikus invariancia követelménye és Wigner-tétele [4] közvetlenül  $\mathcal{P}_+^\uparrow$  egy sugár-reprezentációjára vezet. Ekkor a sugárbeli határozatlan fázis miatt (1)-ben egy egységnyi abszolútértékű szorzó lép fel,  $U$  unitér. Belátható azonban, hogy ezt a szorzófaktort egynek lehet választani, az eredeti  $U(a, \Lambda)$  sugár reprezentációból vektorreprezentációt kaphatunk. Nevezetesen, Wigner bebizonyította, hogy  $\mathcal{P}_+^\uparrow$  minden folytonos unitér sugár-reprezentációját alkalmas fázisfaktor választással a  $(\mathcal{P}_+^\uparrow)$ -lal izomorf inhomogén  $2 \times 2$  unimoduláris csoport folytonos reprezentációjaként lehet tekinteni. Voltaképpen az utóbbi csoport paramétereitől függ az (1)-beli  $U$ .

Az  $(a, 1)$  alakú elemek képezik a transzlációs csoportot. A transzlációs csoport  $U(a, 1)$  reprezentációja egyértelműen definiál egy nemkorlátos, önadjungált  $P_\mu$  operátort (1. Függelék)

$$U(a, 1) = \exp [i(P, a)] \quad (2)$$

A II. posztulátumba beleértjük, hogy  $P_\mu$ -t a terek össz-négyesimpulzus operátorként interpretáljuk. Ennek eredete közismert.

## III. Spektrum feltétel

$(P, P)$  a tömegnégyzet operátor.  $P_\mu$  spektruma az impulzustérben az előrekúpban és azon van. Részletesen: 1. létezik egyetlen  $\Psi_0$  vákuum állapot, mely  $\mathcal{P}_+^\uparrow$  alatt invariáns,  $U(a, \Lambda)\Psi_0 = \Psi_0$ . Erre  $(P, P)$  sajátértéke,  $p^2 = 0$  és ez a legkisebb energiájú állapot,  $p^0 = 0$ . 2. Nem létezik állapot  $p^2 < 0$ -ra, de léteznek  $p^2 \equiv 0$ ,  $p^0 > 0$ -ra (0 tömegű részecskére  $p^2 = 0$ !). A pozitív energiájú állapotok részben az előrekúpon, részben pedig a  $p^2 = m^2$ ,  $m$  alkalmas pozitív szám, hiperboloid felső köpenye fölött fekszenek.



Megjegyezzük, hogy 1. az egyetlen  $\Psi_0$  állapot feltételezése kompatibilis a II. posztulátummal. Ugyanis az unitér  $U$ -ábrázolások vagy végesdimenziósak, de akkor egydimenziós triviális ábrázolások, vagy végtelen dimenziósak (ekkor több vákuum volna, melyeket a Lorentz-transzformáció kever) [5]. Itt az első lehetőséget posztuláltuk. 2. A szokásos térelmélet keretében megmutatható [6], hogy zérus nyugalmi tömegű részek esetén, a vákuum létezése se nem mond ellent a téregyenletnek és felcserélési relációnak, se nem következik abból (energia pozitív) hanem független posztulátum. A spektrum-feltétel a fizikai rendszerektől megkívánható legalapvetőbb tulajdonságokat foglalja magába.

#### IV. Téropерátorokra vonatkozó feltevések

1. Minden  $f \in \mathbb{S}(M)$  próbafüggvényhez  $\mathcal{H}$  (nemkorlátos) operátorainak egy  $\varphi_\mu^k(f)$  sorozatát rendeljük,  $\mu = 1, \dots, \alpha_k$ ;  $k = \pm 1, \dots, \pm \alpha$ .  $\varphi_\mu^{-k}(f) \equiv \varphi_\mu^k(f)^*$ ,  $k > 0$  és a  $*$  adjungálást jelöl.  $k$  a különféle tereket különbözteti meg. A  $k$ -térnek több komponense is lehet, ezt  $\mu$  jelzi.

2. Az összes  $\varphi_\mu^k(f)$   $\mathcal{H}$ -nak egy közös lineáris  $D$  részhalmozán úgy van definiálva, hogy 3.  $D$  sűrű  $\mathcal{H}$ -ban és tartalmazza  $\Psi_0$ -t,  $\Psi_0 \in D$ , valamint 4.  $U(a, \Lambda)$  és  $\varphi_\mu^k(f)$   $D$ -beli vektorokat  $D$ -beli vektorokba visznek,  $U(a, \Lambda)D \subset DC$ ,  $\varphi_\mu^k(f)D \subset D$ . 3-on túlmenően feltesszük, hogy 5. a vákuum a téropерátorokra vonatkozóan ciklikus. Ez azt jelenti, hogy a  $\varphi_\mu^k(f)$ -ekből (különféle  $k, \mu, f$ -ekkel) képezett különféle polinomnak  $\Psi_0$ -ra való alkalmazásával előálló  $D$ -elemek lineáris halmaza,  $K \subset D$ , sűrű  $\mathcal{H}$ -ban. Vagyis  $K$  lezárása éppen  $\mathcal{H}$ ,  $\bar{K} = \mathcal{H}$  (teljesség).

6. A téropерátorokat lineáris és folytonos módon rendeljük  $\mathbb{S}(M)$  elemeihez,  $\varphi_\mu^k(f)$  operátor értékű disztribúció. Tehát akármilyen  $\Psi_1 \in \mathcal{H}$ ,  $\Psi_2 \in D$ -re ( $\Psi_1, \varphi_\mu^k(f)\Psi_2$ ) mérsékelt disztribúció. ( $\mathbb{S}$ -n értelmezett lineáris folytonos funkcióknál. A folytonosság gyenge konvergencia értelemben veendő, másszóval ha  $f_n \rightarrow f$  az  $\mathbb{S}$ -ben, akkor a  $(\Psi_1, \varphi_\mu^k(f_n)\Psi_2)$  számsorozat is tart  $(\Psi_1, \varphi_\mu^k(f)\Psi_2)$ -höz.)

7. Lorentz-transzformációkor a tér meghatározott módon transzformálódik; a szokásos transzformációs tulajdonságot szétkent terekre alkalmazva jutunk az

$$U(a, \Lambda)\varphi_\mu^k(f)U(a, \Lambda)^{-1} = \sum_{\nu} S_{\mu}^{(k)\nu}(\Lambda^{-1})\varphi_{\nu}^k(L(a, \Lambda)f) \quad (3)$$

feltevéshez ( $D$  vektoraira alkalmazva). Itt

$$(L(a, \Lambda)f)(x) = f(\Lambda^{-1}(x - a)). \quad (4)$$

Ha  $f \in \mathbb{S}$ , akkor  $Lf \in \mathbb{S} \cdot S_{\mu}^{(k)\nu}$  négydimenziós irreducibilis ábrázolása az  $L_+^{\dagger}(R)$ -nek,  $S_{\mu}^{(-k)\nu}(\Lambda) = S_{\mu}^{(k)\nu}(\Lambda)^*$ . Nem kötelező feltenni, hogy (3)-ban  $S$  irreducibilis legyen (pl. Dirac-tér).

$\varphi_\mu^k(f)$ -et az általánosan használt  $\varphi_\mu^k(x)$  téropерátorokkal szimbólikusan a

$$\varphi_\mu^k(f) = \int \varphi_\mu^k(x)f(x)dx \quad (5)$$

alakba írhatjuk. A szokásosan megkövetelt transzformációs karakter  $\varphi_\mu^k(x)$ -re

$$U(a, \Lambda)\varphi_\mu^k(x)U(a, \Lambda)^{-1} = \sum_{\nu} S_{\mu}^{(k)\nu}(\Lambda^{-1})\varphi_{\nu}^k(\Lambda x + a). \quad (6)$$



Pl. skalár térnél (0 spinű)  $\mu=1$ ,  $S_\mu^{(k)v} = \delta_{1v}$ , vektortétnél (1 spinű)  $\mu=0, \dots, 3$  és  $S_\mu^{(k)v}(A) = A_\mu^v$ , stb.

A következő észrevételeket tesszük. A  $P_\mu$  operátoroknak legalább  $K$ -n értelmezve kell lenniük. A szabad skalár tér esetére E. C. G. Sudarshan megmutatta, hogy a téroperátor-gyűrűnek csak a szokásos Fock-reprezentációja engedi meg az  $U(a, A)$  unitér-familiát, melyet (3)-ba kell írni. Az összes többi, nem standard reprezentációban hiányzik a Lorentz-kovariancia [7].

#### V. Lokális kommutativitás

Legyen  $f(x), g(y) \in \mathcal{S}(M)$  és  $f(x)g(y) = 0$  az összes  $(x-y)^2 \geq 0$  pontokra; vagyis  $f$  és  $g$  tartója egymáshoz térszerűen fekszik. Feltesszük, hogy

$$\varphi_\mu^k(f)\varphi_\nu^l(g) = \sigma(k, l)\varphi_\nu^l(g)\varphi_\mu^k(f) \quad (7)$$

(tetszőszerinti  $D$ -elemre), ahol a  $\sigma(k, l)$  szám csak a térfajtatól függ és  $+1$  vagy  $-1$ . Szokványos beszédmódban: térszerű szeparációk esetén a téroperátorok kommutálnak vagy antikommutálnak.

A  $\sigma$  választásával kapcsolatos kérdéseket az axiómák alapján meg lehet választani (lásd a későbbi részekben, spin és statisztika kapcsolata). A Wightman-függvények analitikus tulajdonságainak bizonyításánál csak (7) alakjára lesz szükség.

A térszerű szeparációknál való felcserélhetőségnek az a klasszikus analogonja van, hogy térszerű tartományokban a fizikai mennyiségek mérése függetlenül történhet, ezért operátoraik felcserélhetők.

A kanonikus csereléseket nem építjük be az elméletbe, mert a közöségben szétcent operátorokat tételezne fel.

Ezzel felsoroltuk a Wightman-féle formulázás posztulátumait.

Az ütközések elméletével való kapcsolat megteremtésére még egy további feltevés szükséges.

#### VI. Aszimptotikus teljesség

Az in- ill. out-állapotok által kifeszített Hilbert terekre:  $\mathcal{H}_{in} = \mathcal{H}_{out} = \mathcal{H}$ . Az in- és out-állapotokat, mint ütközési állapotokat, alkalmas módon kell származtatni az előző posztulátumok felhasználásával (lásd később).

### 3. §. Megjegyzések az axiómákról

Az I–VI. axiómák nem ellentmondásosak. Hiszen pl. a szabad részek térelmélete teljesíti e követelményeket, mutatván axiómáink kompatibilitását [8]. De könnyű konstruálni másféle, az axiómákat kielégítő tereket is. A Wick-polinomok által definiált terekre pl. szintén fennállnak az axiómák (az  $S$ -mátrix triviális, lásd a Borchers-osztályoknál később). Ilyen tér pl. a  $\varphi(x)$  szabad, semleges skalár térből képezett

$$\psi(x) = \varphi(x) + :\partial_\mu \varphi(x)\partial^\mu \varphi(x): \quad (8)$$

Wick polinom, stb. Itt

$$:\partial_\mu \varphi(x)\partial^\mu \varphi(x): = \lim_{x_1, x_2 \rightarrow x} (\partial_\mu \varphi(x_1)\partial^\mu \varphi(x_2) - (\Psi_0, \partial_\mu \varphi(x_1)\partial^\mu \varphi(x_2)\Psi_0)). \quad (9)$$



Ma az egyik középponti probléma az, hogy az axiómákat kielégítő térelméleteket találjunk nem triviális  $S$ -mátrixszal.

Mint látjuk, az egyik lényeges feltevésünk az, hogy a közönséges téroperátorokat az  $\mathbb{S}$  (vagy a  $\mathfrak{D}_x$ )-tér függvényeivel szét kell kenni. Ez szemléletesen a tér lokalizálhatóságának (lokalizált állapotoknak) felel meg. Látni fogjuk, hogy a renormálható térelméletek ebbe az osztályba tartoznak. A nemrenormálható elméletek vizsgálata azonban azt mutatja, legalábbis néhány példa kapcsán, hogy ott nem lokalizálható terek szerepelnek, az  $\mathbb{S}$ ,  $\mathfrak{D}_x$  osztályok nem alkalmasak [9]. Ez azzal függ össze, hogy nemrenormálható térelméletekben, kis távolságokon, a Wightman-függvények akármi is  $1/x^m$ -nél is jobban divergálnak,  $m > 0$ .

A szétkent operátorok fogalmával összefüggésben megjegyezzük, hogy ha  $\varphi(f)$  az  $\mathbb{S}$  ill.  $\mathfrak{D}$  térrel elkent skalár tér, melyre I–IV. teljesül, akkor a

$$(\varphi_a)(\underline{x}) = \int \varphi(x_0, \underline{x}) \alpha(x_0) dx_0, \quad \alpha \in \mathbb{S} \text{ ill. } \mathfrak{D} \quad (10)$$

egy  $\underline{x}$ -től függő nemkorlátos téroperátort definiál és ez  $\underline{x}$  szerint akárhányszor deriválható [10]. A téroperátorokat elég az időben szétkenni.

Az axiómák között szerepel a lokális kommutativitás erős feltevése. Ezzel kapcsolatban be fogjuk látni, hogy ha a lokális kommutativitás nagy térszerű távolságokra fennáll, akkor akármi is (kicsire!) is. Általában a térelméletekben nem kommutatív operátorok szerepelnek. Érdemes megjegyezni, hogy ha két téroperátor kommutátora egy  $c$ -szám

$$[\varphi(f), \varphi(g)] = c(f, g), \quad (11)$$

akkor  $\varphi$  nem lehet korlátos. Tegyük ugyanis fel az ellenkezőjét és vizsgáljuk a (11)-ből adódó

$$[\varphi(f), \varphi^n(g)] = cn\varphi(g)^{n-1} \quad (12)$$

normáját. Könnyű látni, hogy

$$\|\varphi(f)\varphi(g)^n\| \leq \|\varphi(f)\| \cdot \|\varphi(g)\| \cdot \|\varphi(g)\|^{n-1} \quad (13)$$

és (12), (13)-ból

$$cn\|\varphi(g)\|^{n-1} \leq 2\|\varphi(f)\| \cdot \|\varphi(g)\| \cdot \|\varphi(g)\|^{n-1} \quad (14)$$

Ez pedig minden  $n$ -re nem teljesülhet.

Fontos szerepet játszik az axiómák közt a vákuum ciklikussága. Ez a feltétel az, ami megtiltja, hogy pl. a téroperátor egy  $c$ -szám legyen. A vákuum ciklikusságának és a tér irreducibilitásának kapcsolatát később tárgyaljuk.

A legegyszerűbb tér a semleges skalár tér,  $\varphi$ . Itt az egyik alapvető kérdés  $\varphi$  önadjungáltsága. Ezzel a kérdéssel Borchers és Zimmermann foglalkozott részletesen [11]. A következőket lehet megállapítani. Tegyük fel, hogy  $\varphi(f)$  kielégíti az I–V. axiómát,  $f \in \mathfrak{D}$  és valós,  $\sigma = 1$ ,  $\varphi$  hermitikus. Tegyük még fel, hogy a vákuum analitikus vektor minden  $\varphi(f)$ -re. Ekkor belátható, hogy  $\varphi(f)$  lezárása,  $\overline{\varphi(f)}$  önadjungált. A bizonyításban Nelson tételét (I. Függelék) és Reeh és Schlieder egy érdekes tételét [12] kell kihasználni. Utóbbi:

Tekintsük az összes  $\Psi_0, \varphi(g)\Psi_0, \dots, \varphi(g_1)\dots\varphi(g_n)\Psi_0, \dots$  alakú vektorok lineáris spannungját,  $D_G$ -t, ahol  $G$  egy tetszés szerinti nyílt halmaz a Minkowski térben és a  $g_i$  próbafüggvények  $G$ -n kívül eltűnnek, azaz  $\text{Supp } g_i \in G$ . Belátható,



hogy  $D_G$  sűrű  $\mathcal{H}$ -ban. (Így  $\varphi(f)$ -et korlátozhatjuk  $D_G$ -re, legyen ez a korlátozás  $\varphi(f)_G$ . Belátható, hogy  $\varphi(f)$  és  $\varphi(f)_G$  lezárásai megegyeznek,  $\overline{\varphi(f)} = \overline{\varphi(f)_G}$ , [11].)  $\overline{\varphi(f)}$  önadjungáltságát ezután úgy bizonyíthatjuk, hogy  $G$ -t az  $f$  tartójától térszerűen szeparáltnak választjuk és belátjuk, hogy  $D_G$  a  $\varphi(f)$  analitikus vektoraiból áll. Így  $\overline{\varphi(f)} = \varphi(f)^*$ .

Mínthogy a Neumann-kritériumból  $\overline{\varphi} = \varphi^{**}$  valamint  $\overline{\varphi^*} = \varphi^{***}$ , látszik, hogy  $\varphi(f)$  lényegesen önadjungált,  $\varphi^*(f) = \varphi^{***}(f) = \overline{\varphi(f)^*} = \overline{\varphi(f)} = \varphi(f)^{**}$ .

Ha  $\Psi_0$  nem analitikus vektora  $\varphi(f)$ -nek, akkor  $\overline{\varphi(f)}$  csak szimmetrikus. ( $\varphi(f)^{**}$  szimmetrikus.)

A vákuum analitikus vektorsága összefügg a Wightman disztribúciók generáló funkcionáljának létezésével, nevezetesen  $\Psi_0$  akkor és csak akkor analitikus minden  $\varphi(f)$ -re, ha

$$W\{zf\} = \langle \exp[z\varphi(f)] \rangle_0 > 0 \quad (15)$$

létezik és a  $z$  paraméterben  $z=0$ -nál analitikus.

## 1. FÜGGELÉK

### Operátorok a Hilbert-térben

A dolgozat olvashatósága érdekében néhány felhasznált fogalmat és tételt rögzítünk (lásd pl. [13]).

Az elemi részek kvantumtérelméletében mind szeparábilis, mind pedig nem-szeparábilis Hilbert teret,  $\mathcal{H}$ , felhasználnak. A Wightman-féle formulázásban azonban  $\mathcal{H}$  szeparábilis, vagyis a szokásos tulajdonságokon kívül rendelkezik egy megszámlálható és sűrű részhalmazzal. Egy  $K$  halmaz sűrű  $\mathcal{H}$ -ban, ha  $\mathcal{H}$  bármely eleméhez van tetszés szerinti (normában) közel eső  $K$ -beli elem. Másként:  $K$  lezárása,  $\overline{K} = \mathcal{H}$ .  $K$  úgy zárható le, hogy elemeivel képezzük az összes konvergens sorozatokat, s azok határértékeit is hozzávesszük  $K$ -hoz. Ha  $\mathcal{H}$  szeparábilis, akkor ortonormált rendszereinek vektorait sorszámozhatjuk. Ha viszont  $\mathcal{H}$ -ban van kontinuum számosságú lineárisan független ortonormált vektor, akkor  $\mathcal{H}$  nem-szeparábilis.

Legyen  $D_A$   $\mathcal{H}$ -nak egy részhalmaza, akkor definiáljuk az  $A$  operátort  $D_A$ -n:  $A$   $D_A$  minden eleméhez hozzárendeli  $\mathcal{H}$  valamelyik elemét.  $A$ -t lineárisnak nevezzük, ha értelmezési tartománya,  $D_A$  lineáris sokaság (azaz bármely két elemével, azok lineár kombinációi is  $D_A$ -ban vannak) és  $A$ -t a lineárkombináció elemeire tagonként lehet alkalmazni, a konstansok  $A$  elé hozhatók.

Legyen  $D_A$  sűrű.  $A$  adjungáltját,  $A^*$ , értelmezzük:  $A^*$  azokra a  $\Phi \in \mathcal{H}$  elemekre van értelmezve, melyekre létezik oly  $\Phi' \in \mathcal{H}$  elemek, hogy

$$(\Phi', \psi) = (\Phi, A\psi), \quad \psi \in D_A. \quad (1)$$

Ekkor  $\Phi' = A^*\Phi$  definiálja  $A^*$ -ot. A  $\Phi$ -k összessége  $A^*$  értelmezési tartománya,  $D_{A^*}$ . Ha  $A^*$  létezik, akkor evidens módon lineáris operátor. Mínthogy  $A$  sűrűn definiált, (1)-ből látszik, hogy egyetlen  $A^*$  létezik.



Az  $A$  lineáris, sűrűn értelmezett operátor hermitikus v. szimmetrikus, ha minden  $\psi, \Phi \in D_A$ -ra

$$(\Phi, A\psi) = (A\Phi, \psi); \quad (2)$$

önadjungált, ha  $A = A^*$ ,  $D_A = D_{A^*}$ , és lényegesen önadjungált, ha  $A^* = A^{**}$ ,  $D_{A^*} = D_{A^{**}}$ . Ha  $A = A^*$ ,  $A$  szimmetrikus.

Az  $A$  operátort korlátosnak nevezzük, ha minden  $\Phi \in D_A$ -ra

$$\|A\Phi\| \leq M\|\Phi\| \quad (3)$$

és  $M$  a  $\Phi$ -től független szám. Az  $M$  korlátok közül a legkisebbet  $A$  normájának nevezzük,  $\|A\|$ .  $A$  nemkorlátos, ha  $\Phi$ -től független  $M$ -et nem lehet találni.

Egy  $B$  operátor az  $A$ -nak kiterjesztése, ha  $\Phi \in D_A$ -ra  $A\Phi = B\Phi$  és  $D_A \subset D_B$ . Jelölése  $A \subset B$ . Pl. szimmetrikus operátor kiterjesztése az adjungált. Legyen  $A$  sűrűn definiált, s legyen  $D_B$  egy lineáris,  $\mathcal{H}$ -ban sűrű részhalmaza  $D_A$ -nak, akkor  $A$ -nak  $D_B$ -re vonatkozó  $B$  korlátozásán azt az operátort értjük, melyre  $B\Phi = A\Phi$ ,  $\Phi \in D_B$ ,  $D_B \subset D_A$ .

*Hellinger és Toeplitz tétele:*  $A$  teljes  $\mathcal{H}$ -n definiált lineáris és szimmetrikus operátor szükségképpen korlátos. Tehát lineáris, szimmetrikus, de nemkorlátos operátor nem lehet az egész  $\mathcal{H}$ -n definiálva.

Viszont mindig elérhető, hogy egy lineáris és korlátos operátornak az egész  $\mathcal{H}$ -ra legyen lineáris kiterjesztése. A korlátos lineáris operátorok folytonosak, azaz  $D_A$ -ban  $\Phi_n \rightarrow \Phi$ -ből következik  $A\Phi_n \rightarrow A\Phi$  (erős konvergencia). A nemkorlátos lineáris operátorok nemfolytonosak.

Az  $A$  operátort zártnak nevezzük, ha  $\psi_n \in D_A$ ,  $\psi_n \rightarrow \psi$  és  $A\psi_n \rightarrow \Phi$  tartalmazza, hogy  $\psi \in D_A$  és  $A\psi = \Phi$ . Pl.  $A^*$  zárt, ugyanis az erős konvergencia tartalmazza a gyengét és

$$(A\psi', \Psi) = \lim_{n \rightarrow \infty} (A\psi', \Psi_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\psi', A^* \Psi_n) = (\psi', \Phi), \quad (14)$$

$$\psi' \in D_A \quad \Psi_n \in D_{A^*} \quad \Psi \in \mathcal{H}$$

így  $\Phi = A^*\psi$  és  $\psi \in D_{A^*}$ . A zárt operátor nem feltétlenül folytonos.

Minden teljes  $\mathcal{H}$ -n definiált lineáris, zárt operátor korlátos (zárt gráf tétel). Ilyen operátornak automatikusan van adjungáltja, ugyanis (1) jobb oldala fix  $\Phi$ -re  $\psi$  funkcionálja és minden  $\mathcal{H}$ -n definiált lineáris funkcionált (1) bal oldali alakjában lehet felírni. Az adjungált az egész  $\mathcal{H}$ -n értelmezve van.

Tétel: Ha  $A$  lineáris és zárt, sűrűn értelmezett operátor, akkor 1.  $A^*$  értelmezési tartománya is sűrű  $\mathcal{H}$ -ban, 2.  $A^{**}$  létezik, 3.  $A^{**} = A$ . Az előző tétel feltételeivel, s  $A^*$ -ra való alkalmazással  $A^{***} = A^*$ .

*Neumann-kritérium:* Legyen  $A$  egy lineáris, sűrűn definiált operátor.  $A$ -nak akkor és csakis akkor létezik zárt, lineáris kiterjesztése, ha  $A^*$  értelmezési tartománya sűrű  $\mathcal{H}$ -ban. Ekkor  $\bar{A} = A^{**}$ .  $\bar{A}$  jelöli  $A$ -nak a legkisebb zárt, lineáris kiterjesztését,  $A$  lezárását. ( $A$  minden más lineáris, zárt kiterjesztése  $\bar{A}$ -nak is kiterjesztése.)

$\bar{A}$ -t úgy kapjuk meg, hogy vesszük az összes  $\psi_n \in D_A$  sorozatokat, melyre  $\psi_n \rightarrow \psi$ ,  $A\psi_n \rightarrow \Phi$ , ahol  $\psi, \Phi \in \mathcal{H}$  és  $\bar{A}\psi \stackrel{\text{def}}{=} \Phi$ . Semleges skalártérnél létezik lezárás. Általában minden szimmetrikus operátornak van zárt, lineáris és szimmetrikus kiterjesztése,  $A^{**}$ .

Tétel: Az  $A$  szimmetrikus operátor lezárása akkor és csakis akkor önadjungált, ha minden nem valós  $\lambda$  számra az  $(A - \lambda)D_A$  halmaz sűrű  $\mathcal{H}$ -ban.



**Nelson tétele:** Ha  $A$  szimmetrikus operátor és ha létezik  $A$  analitikus vektorainak egy sűrű  $D_A^\circ \subset D_A$  részhalmaza, akkor  $\bar{A}$  önadjungált. Megjegyzés:  $\Phi \in \mathcal{H}$ -t az  $A$  analitikus vektorának hívjuk, ha a

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|A^n \Phi\|}{n!} z^n \quad (5)$$

hatványsornak nemzérus konvergencia rádiusza van.

A  $\mathcal{H}$ -n értelmezett  $U$  operátort izometrikusnak nevezzük, ha a skalárszorzatot invariánsul hagyja,

$$(U\Phi, U\psi) = (\Phi, \psi) \quad \Phi, \psi \in \mathcal{H}, \quad (6)$$

azaz ha  $U^*U = 1$ . Ha  $U$   $\mathcal{H}$ -t a teljes  $\mathcal{H}$ -ra képezi le, akkor  $U$  unitér operátor. Erre  $U^*U = UU^* = 1$ . Tétel: Ha  $U$  mindenhol definiált, s minden értékét csak egyszer veszi fel (akkor van inverze) akkor  $U$  unitér, feltéve, hogy

$$\|U\Phi\| = \|\Phi\|, \quad \Phi \in \mathcal{H}. \quad (7)$$

**Stone tétele:** Az  $\{U_t\}$ ,  $-\infty < t < \infty$  unitér transzformációk minden folytonos csoportja általában nemkorlátos, önadjungált  $A$  transzformációból generálható

$$U_t = e^{itA}, \quad iA = \text{erős} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U_h - 1}{h} \quad (8)$$

(ahol  $A$ -t,  $U_t$ -t spektráelőállításaiikkal reprezentáljuk

$$U_t = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda t} dE_\lambda, \quad A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda. \quad (9)$$

Vagy  $A$ -ra való hivatkozás nélkül: Unitér operátorok minden egyparaméteres  $\{U_t\}$  csoportja, melyre  $(U_t\Phi, \psi)$   $t$  folytonos függvénye, a (9) első képletével adott spektrál előállítással rendelkezik, ahol az  $\{E_\lambda\}$  spektrál família egyértelműen meghatározott és minden szimmetrikus, korlátos, minden  $U_t$ -vel felcserélhető operátor az  $E_\lambda$ -val is felcserélhető. (Akkor mondjuk, hogy egy  $B$  lineáris, korlátos operátor felcserélhető a  $T$  (nem feltétlenül korlátos) lineáris operátorral, ha  $BT \subseteq TB$ .)

## 2. FÜGGELÉK

### Disztribúciók a $\mathfrak{D}$ , $\mathfrak{S}$ téren

A különféle disztribúciókat a térelméletben szinguláris kifejezések, mint pl.  $\delta$ ,  $S_F$ ,  $D_F$  stb értelmesítésére használjuk. Közös bennük az, hogy lineáris, folytonos funkcionálok, eltérnek abban, hogy a különböző függvénytereken más és más konvergencia-fogalommal kell dolgozni. A térelméletben a  $\mathfrak{D}(O)$ ,  $\mathfrak{D}$ , de főleg az  $\mathfrak{S}$  függvénytéren értelmezett disztribúciók jelentősek (lásd pl. [14]).

# I. $\mathfrak{D}(O)$ és $\mathfrak{D}$ téren értelmezett disztribúciók

$O$  jelöljön egy nyílt halmazt az  $n$  dimenziós, valós, euklideszi térben,  $R^n$ -ben. Az  $O$ -ban definiált  $f(x)$  függvény tartóján értjük azt a legkisebb zárt részhalmazt, amelyen kívül  $f(x)$  eltűnik.  $f(x)$  tartója kompakt, ha zárt, korlátos részhalmaza  $O$ -nak.  $\mathfrak{D}(O)$  jelölje az  $O$ -n akárhányszor deriválható, komplex értékű,  $O$ -beli tartójú függvények halmazát. Ha a kompakt tartók az egész  $R^n$ -be eshetnek, a  $\mathfrak{D}$ -halmazról beszélünk.  $\mathfrak{D}(O)$  ( $\mathfrak{D}$ ) egy  $f_n$  sorozatát 0-hoz tartónak hívunk,  $f_n \rightarrow 0$ , ha minden  $f_n$  tartója ugyanabba a zárt részintervallumba esik és  $f_n$  összes deriváltjaival egyenletesen tart 0-hoz. Ugyanígy,  $f_n$  tart  $f$ -hez  $\mathfrak{D}(O)$  ( $\mathfrak{D}$ -ben, ha  $f_n - f \rightarrow 0$  (konvergenzia fogalom  $\mathfrak{D}$ -ben). Pl.  $\mathfrak{D}$ -beli függvény az

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x \notin (a, b) \\ \exp \left( - \sum_i \left( \frac{1}{x_i - a_i} + \frac{1}{b_i - x_i} \right) \right) & a \leq x \leq b \end{cases} \quad (10)$$

$T$ -t disztribúciónak nevezzük, ha akármelyik  $\mathfrak{D}(O)$  ( $\mathfrak{D}$ )-beli közös tartójú függvényhalmaz fölött lineáris, folytonos funkcionál, azaz minden  $f$ -hez egy  $T(f)$  számot rendel és erre fennáll

1.  $T(f_1 + f_2) = T(f_1) + T(f_2)$
  2.  $T(cf) = cT(f)$ ,  $c$  állandó
  3. ha  $f_n \rightarrow 0$ , akkor  $T(f_n) \rightarrow 0$ .
- (11)

$\mathfrak{D}(O)$  duális terén,  $\mathfrak{D}(O)^*$ , a  $\mathfrak{D}(O)$ -n értelmezett disztribúciók összességét fogjuk érteni. Ha  $T_1, T_2 \in \mathfrak{D}(O)^*$  vagy  $\mathfrak{D}^*$ , akkor  $T_1 + T_2$  is,  $(T_1 + T_2)(f) = T_1(f) + T_2(f)$ . Ha  $\alpha(x)$  mindenütt akárhányszor deriválható, akkor  $\alpha T$  jelentse  $\alpha T(f) = T(\alpha f)$ ,  $\alpha T$  is disztribúció. Ha bármely  $f \in \mathfrak{D}(O)$ -ra  $T(f) = 0$ , akkor azt mondjuk, hogy  $T = 0$   $O$ -ban. Így  $O$ -ban  $T_1 = T_2$ , ha  $T_1 - T_2 = 0$ .

A disztribúció a függvényfogalom általánosítása. Ha ugyanis  $T(x)$   $O$  minden zárt részintervallumán integrálható, akkor

$$T(f) = \int_{-\infty}^{\infty} T(x)f(x)dx \quad (12)$$

eleme  $\mathfrak{D}(O)^*$ -nak.

Példa: A Dirac-féle  $\delta$ -t disztribúció értelemben kell tekinteni,

$$\delta(f) = f(0) \quad \delta \in \mathfrak{D}^*.$$

Vessük alá  $f(x)$ -et egy  $\tau_h$  transzlációnak

$$\tau_h f(x) = f(x_1 - h_1, \dots, x_n - h_n). \quad (13)$$

Definiáljuk a transzlációnak alávetett disztribúciót

$$\tau_h T(f) = T(\tau_{-h} f). \quad (14)$$

$\tau_h T$  disztribúció, értelmezési tartománya az  $(x - h)$  koordinátájú pontokból áll.  $T$  függetlensége az  $x_k$ -től jelentse azt, hogy  $\tau_h T = T$ ,  $h = (0, \dots, 0, h_k, 0, \dots, 0)$ .



Legyen  $f \in \mathfrak{D}$ ,  $T \in \mathfrak{D}^*$ , s definiáljuk  $T$   $x_k$  szerinti parciális deriváltját

$$\frac{\partial T}{\partial x_k} = \lim_{h_k \rightarrow 0} \frac{\tau_{-h} T - T}{h_k}, \quad h = (0, \dots, 0, h_k, 0, \dots, 0) \quad (15)$$

Minthogy

$$\left( \frac{\partial T}{\partial x_k} - \frac{\tau_{-h} T - T}{h_k} \right) (f) = \frac{\partial T}{\partial x_k} (f) + T \left( \frac{\tau_h f - f}{-h_k} \right), \quad (16)$$

látszik, hogy  $h_k \rightarrow 0$ -ra

$$\frac{\partial T}{\partial x_k} (f) = -T \left( \frac{\partial f}{\partial x_k} \right) \quad (17)$$

és  $\frac{\partial T}{\partial x_k} \in \mathfrak{D}^*$ .  $T$  akárhányszor deriválható. Vegyes deriváltak megegyeznek. Példa:

A Heaviside-függvény,

$$y(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (18)$$

disztribúció értelemben vett deriváltja a  $\delta$ -disztribúció

$$\frac{dy}{dx} (f) = -y \left( \frac{df}{dx} \right) = - \int_0^{\infty} \frac{df}{dx} dx = \delta(f), \quad (19)$$

$$\delta^{(p)}(f) = (-1)^p \varphi^{(p)}(0).$$

Az  $S \in \mathfrak{D}^*_{x_k}$ -primitív disztribúciója az a  $T \in \mathfrak{D}^*$ , melynek  $x_k$  szerinti disztribúció-deriváltja  $S$ -sel egyenlő. Belátható, hogy minden  $S$ -hez végtelen sok primitív disztribúció tartozik.

Tekintsünk  $(T_n) \in \mathfrak{D}(O)^*$  disztribúció sorozatokat.  $(T_n)$  korlátos, ha  $T_n(f)$  minden  $f$ -re egy  $n$ -től független korlát alatt marad.  $T_n$  tart  $T$ -hez,  $T_n \rightarrow T \in \mathfrak{D}(O)^*$ , ha minden  $f$ -re  $T_n(f) \rightarrow T(f)$ . Ha  $T_n \rightarrow T$ , akkor  $T'_n \rightarrow T'$ , ezért disztribúciókból álló végtelen sort szabad tagonként deriválni, s a határérték az eredeti sor határértékének disztribúció-deriváltja.  $\sum_{n=1}^{\infty} T_n$ -t konvergensenek mondjuk, ha a  $\sum_{n=1}^m T_n$  sorozat konvergens.

Nagyon jelentős, hogy  $\mathfrak{D}(O)^*$  elemeinek szerkezetét tudjuk. Kimutatható, hogy minden  $T \in \mathfrak{D}(O)^*$

$$T(f) = \sum_k \int D^k f d\mu_k, \quad \begin{aligned} k &= (k_1, \dots, k_n) \\ D^k &= \frac{\partial^{k_1 + \dots + k_n}}{\partial x_1^{k_1} \dots \partial x_n^{k_n}}, \end{aligned} \quad (20)$$

ahol a  $\mu_k$  mértékek a következő tulajdonsággal rendelkeznek:  $O$ -nak minden  $K$  kompakt részhalmazához van oly  $N$ , hogy  $\mu_k = 0$   $K - n$  ha  $|k| \equiv k_1 + \dots + k_n \equiv N$ . Ez annak felel meg, hogy a fix, zárt intervallumon értelmezett  $T$  folytonos, lineáris funkcionálhoz mindig lehet találni oly mérhető függvényt, melynek valamelyik disztribúció deriváltja  $T$ -vel egyenlő.

## II. Mérsékelt disztribúciók

Az  $\mathbb{S}$  függvénytéren értelmezett lineáris, folytonos funkcionálokat mérsékelt disztribúcióknak nevezzük.  $\mathbb{S}$  definíciója:  $f(x) \in \mathbb{S}$ , ha 1. akárhányszor deriválható  $R^n$ -ben, 2.  $|x_\alpha D^\beta f(x)| \leq M_{\alpha\beta}$  minden  $\alpha, \beta$ -ra, ahol  $x_\alpha = x_1^{\alpha_1} \dots x_n^{\alpha_n}$ , vagyis  $|x_\alpha D^\beta f| \rightarrow 0$ , minden  $\alpha, \beta$ -ra ha az euklideszi távolság,  $|x| \rightarrow \infty$ . Például  $\exp(-\pi x^2)$ ,  $\exp(-x^{2n})$  ( $n > 0$ )  $\in \mathbb{S}$ . Defináljuk az

$$\|f\|_{r,s} = \sum_k \sum_{|l| \leq s} \sup_x |x^k D^l f(x)| \quad (21)$$

mennyiséget minden nem negatív, egész  $r, s$ -re.  $\|f\|_{r,s}$  kielégíti a norma tulajdonságait.  $\mathbb{S}$  definíciójában 2.-t  $\|f\|_{r,s} < \infty$ -nel helyettesítjük (minden egész  $r, s \geq 0$ -ra) Az  $f_n \in \mathbb{S}$  sorozatról azt mondjuk, hogy  $f \in \mathbb{S}$ -hez konvergál, ha minden  $r, s$ -re

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|_{r,s} = 0. \quad (22)$$

$T$  mérsékelt disztribúció, ha  $T \in \mathbb{S}'$ -en lineáris funkcionál és ha (22) tartalmazza, hogy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |T(f_n) - T(f)| = 0. \quad (23)$$

Az  $\mathbb{S}^*$ -térre hasonló fogalmakat és tételeket lehet levezetni, mint a  $\mathcal{D}^*$ -térre.

Mérsékelt disztribúciók szerkezete: minden  $T \in \mathbb{S}^*$  a

$$T(f) = \sum \int D^2 f d\mu_x \quad (24)$$

formájú, ahol  $\mu_x$  maximálisan polinominális növekedésű és  $\mu_x = 0$ , ha  $|x|$  elég nagy. Tehát az összegben végezzámú tag van és „ $T(x)$   $x \rightarrow \infty$ -re nem nő jobban, mint egy polinom.”

Látható, hogy  $\mathcal{D} \subset \mathbb{S}$  és  $\mathbb{S}^* \subset \mathcal{D}^*$ . (Pl. az  $e^x \in \mathcal{D}^*$ , de  $e^x \notin \mathbb{S}^*$ .)

## IRODALOM

- [1] A. S. Wightman, Phys. Rev., 101, 860, 1956.
- [2] H. Lehmann, K. Symanzik, W. Zimmermann, Nuovo Cimento, 1, 205, 1955; 6, 319, 1957.
- [3] H. Araki, Progr. Theor. Phys. Suppl., No. 18, 83, 1961.
- [4] R. F. Streater, A. S. Wightman, PTC, Spin and Statistics, and All That, W. A. Benjamin, Inc. 1964.
- [5] S. S. Schweber, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Row, Peterson and Co. 1961.
- [6] H. J. Borchers—R. Haag—B. Schroer, Nuovo Cimento, 29, 148, 1963.
- [7] E. C. G. Sudarshan, The Nature of the Axioms of Relativistic Quantum Field Theory II, preprint, 1963.
- [8] W. Schmidt—K. Baumann, Nuovo Cimento, 4, 860, 1956.
- [9] B. Schroer, Journal of Math. Phys., 5, 1361, 1964.
- [10] H. J. Borchers, Nuovo Cimento, 33, 1600, 1964.
- [11] H. J. Borchers, W. Zimmermann, Nuovo Cimento, 31, 1047, 1963.
- [12] H. Reeh—S. Schlieder, Nuovo Cimento, 22, 1051, 1961.
- [13] F. Riesz—B. Sz. Nagy, Leçons d'Analyse Fonctionnelle, Akadémiai Kiadó, 1952.
- [14] L. Gårding—J. L. Lions, Nuovo Cimento Supplémento, 14, 9, 1959.



# A KVANTUMTÉRELMELET ALAPELVEI ÉS LEGÚJABB EREDMÉNYEI II.\*

## A TÉR REKONSTRUKCIÓJA A VÁKUUMÉRTÉKEK ALAPJÁN

PÓCSIK GYÖRGY

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Intézet

Az előző dolgozatban a térelmélet axiómáit tárgyaltuk [1]. Most az a feladatunk, hogy az axiómák következményeit vákuumvárható értékekben fogalmazzuk meg. A vizsgált vákuumértékek, a Wightman-függvények közti, axiómákból adódó összefüggések azért is fontosak, mert számos fontos analitikus tulajdonságra vezetnek, s ezek már közvetlen kapcsolatba hozhatók fizikai eredményekkel. A jelen dolgozat legfontosabb része az, hogy bebizonyítjuk az elmélet Wightman-függvényekből való rekonstruálhatóságát. Ezt a térelmélet keretében Wightman fedezte fel 1956-ban [2]. Első pontos bizonyítása Borchers nevéhez fűződik [3].

A mérsékelt disztribúciókra vonatkozó szükséges tételeket a Függelékben tárgyaljuk. A jelöléseket [1]-ből vettük.

### 1. §. Wightman-függvények tulajdonságai

Tekintsük a téroperátorok szorzatainak vákuum-értékeit

$$(\Psi_0, \varphi_{\mu_0}^{k_0}(f_0) \dots \varphi_{\mu_n}^{k_n}(f_n) \Psi_0) \equiv W_{\mu_0 \dots \mu_n}^{k_0 \dots k_n}(f_0 \otimes \dots \otimes f_n), \quad (1)$$

ahol

$$(f_0 \otimes \dots \otimes f_n)(x_0, \dots, x_n) = f_0(x_0) \dots f_n(x_n), \quad f_i \in \mathbb{S}(M) \quad (2)$$

(1) minden (2) függvényhez számot rendel és akármelyik  $f_i$  változójában mérsékelt disztribúció, ha a többi  $f_j$  fixált. Most alkalmazzuk Schwartz mag-tételét. Eszerint (1)-et kiterjeszthetjük egy  $W_{\mu_0 \dots \mu_n}^{k_0 \dots k_n}(f)$  mérsékelt disztribúcióba, ahol  $f(x_0, \dots, x_n) \in \mathbb{S}(M^{n+1})$ ; ez a disztribúció az (1)-beli magjával egyezik meg, (1. Függelék), s az  $(x_0, \dots, x_n)$  változós függvények  $\mathbb{S}$  terén van értelmezve. Az utóbbi disztribúciót szokásosan Wightman-függvénynek nevezzük. Szokásos jelölésben

$$W_{\mu_0 \dots \mu_n}^{k_0 \dots k_n}(f) = \int W_{\mu_0 \dots \mu_n}^{k_0 \dots k_n}(x_0, \dots, x_n) f(x_0, \dots, x_n) dx_0, \dots, dx_n, \\ W_{\mu_0 \dots \mu_n}^{k_0 \dots k_n}(x_0, \dots, x_n) = (\Psi_0, \varphi_{\mu_0}^{k_0}(x_0) \dots \varphi_{\mu_n}^{k_n}(x_n) \Psi_0). \quad (3)$$

A Wightman-függvényre az axiómákból tulajdonságok adódnak.

I. A pozitív definit normából: Bármilyen  $\alpha, c_{\beta\lambda}$  komplex számokra,  $f_{\beta\lambda}(x_1, \dots, x_\beta) \in \mathbb{S}(M^\beta)$  függvényekre és  $k(\beta\lambda\gamma), \mu(\beta\lambda\gamma)$  indexekre ( $\beta=1, \dots, n; \gamma=1, \dots, \beta$ )

$$|\alpha|^2 + 2\text{Re}[\alpha^* \sum_{\beta=1}^n \sum_{\lambda} c_{\beta\lambda} W_{\mu(\beta\lambda 1) \dots \mu(\beta\lambda \beta)}^{k(\beta\lambda 1) \dots k(\beta\lambda \beta)}(f_{\beta\lambda})] + \\ + \sum_{\substack{\beta, \beta' \\ \lambda, \lambda'}} c_{\beta\lambda}^* c_{\beta'\lambda'} W_{\mu(\beta\lambda\beta) \dots \mu(\beta\lambda 1) \mu(\beta'\lambda' 1) \dots \mu(\beta'\lambda' \beta')}^{-k(\beta\lambda\beta) \dots -k(\beta\lambda 1) k(\beta'\lambda' 1) \dots k(\beta'\lambda' \beta')}(f_{\beta\lambda\beta'\lambda'}) \equiv 0 \quad (4)$$

\* Érkezett 1965. ápr. 8.

ahol

$$f_{\beta\lambda\beta'\lambda'}(x_1, \dots, x_{\beta+\beta'}) = f_{\beta\lambda}(x_\beta, \dots, x_1) f_{\beta'\lambda'}(x_{\beta+1}, \dots, x_{\beta+\beta'}). \quad (5)$$

Ugyanis legyen először  $f_{\beta\lambda} = f_{\beta\lambda 1} \otimes \dots \otimes f_{\beta\lambda\beta}$ ,  $f_{\beta\lambda\beta} \in \mathbb{S}(M)$  és tekintsük  $K$  tetszőleges elemének normáját

$$\|\alpha\Psi_0 + \sum_{\beta=1}^n \sum_{\lambda} c_{\beta\lambda} \varphi_{\mu}^{k(\beta\lambda 1)}(f_{\beta\lambda 1}) \dots \varphi_{\mu}^{k(\beta\lambda\beta)}(f_{\beta\lambda\beta}) \Psi_0\|^2 \geq 0. \quad (6)$$

Ez éppen (4), szorzatfüggvények esetén, innen (4)  $\mathbb{S}(M^\beta)$  függvényeire is teljesül. Pl. skalár térnél  $n=2$ -re

$$\int f_1^*(x_1) w_2(x_1, x_2) f_1(x_2) dx_1 dx_2 \geq 0. \quad (7)$$

Beláthatóan ez annak szükséges és elegendő feltétele, hogy  $w_2(x_1, x_2)$  Fourier transzformáltja legyen egy nem gyorsan növekvő pozitív mértéknek (általánosított Bochner-tétel; skalár térnél a Lehmann-súly pozitív!)

Szemléletesen, fix  $n$ -re  $n$  részecske van jelen és (4) a különféle folyamatok  $S$ -mátrixelemeire ad megszorításokat.

II. „Hermitikusság”. Jelölje a  $k_0, \dots, k_n$  sorozatot  $\varkappa$ , a  $-k_0, \dots, -k_n$  sorozatot  $-\varkappa$ , a  $\mu_0, \dots, \mu_n$  sorozatot  $\mu$ , a  $0, \dots, n$  indexek teljes megfordítását I. Fennáll

$$w_{\mu}^{\varkappa}(f)^* = w_{I\mu}^{-I\varkappa}(f_*), \quad (8)$$

$$f_*(x_0, \dots, x_n) = f(x_n, \dots, x_0).$$

Ugyanis  $f = f_0 \otimes \dots \otimes f_n$ -re

$$(\Psi_0, \varphi_{\mu_0}^{k_0}(f_0) \dots \varphi_{\mu_n}^{k_n}(f_n) \Psi_0)^* = (\Psi_0, \varphi_{\mu_n}^{-k_n}(f_n) \dots \varphi_{\mu_0}^{-k_0}(f_0) \Psi_0), \quad (9)$$

ez pedig általános  $f$ -re kiterjeszthető. Pl. egyetlen valós skalár térnél

$$w_n(x_1, \dots, x_n)^* = w_n(x_n, \dots, x_1). \quad (10)$$

### III. Lorentz-kovariancia:

$$w_{\mu}^{\varkappa}(f) = \sum_{\nu} S^{\varkappa}(A^{-1})_{\mu}^{\nu} w_{\nu}^{\varkappa}(L(a, A)f). \quad (11)$$

Itt

$$[L(a, A)f](x_0, \dots, x_n) = f(A^{-1}(x_0 - a), \dots, A^{-1}(x_n - a)), \quad (12)$$

$$S^{\varkappa}(A)_{\mu}^{\nu} = S_{\mu_0}^{(k_0)\nu_0}(A) \dots S_{\mu_n}^{(k_n)\nu_n}(A).$$

Ugyanis a  $\varphi$ -k transzformációs karakterét és a vákuum invarianciáját kihasználva  $f = f_0 \otimes \dots \otimes f_n$ -re fennáll

$$\begin{aligned} w_{\mu}^{\varkappa}(f_0 \otimes \dots \otimes f_n) &= (U(a, A)\Psi_0, \sum_{\nu_0} S_{\mu_0}^{(k_0)\nu_0}(A^{-1}) \varphi_{\nu_0}^{k_0}(L(a, A)f_0) \dots \Psi_0) = \\ &= \sum_{\nu_0, \dots, \nu_n} S_{\mu_0}^{(k_0)\nu_0}(A^{-1}) \dots S_{\mu_n}^{(k_n)\nu_n}(A^{-1}) w_{\nu}^{\varkappa}(L(a, A)f_0 \otimes \dots \otimes L(a, A)f_n). \end{aligned} \quad (13)$$

Ebből (12) már közvetlenül látszik.



Ha az  $S^{(k_i)}$ -k sorozatában páratlan számú kétértékű reprezentáció van, akkor  $w_\mu^\times = 0$  ( $a = 0!$ ).  $S^\times(A)_\mu^\nu$  is végesdimenziós ábrázolása  $L_+^\dagger(R)$ -nek, de általában reducibilis.

(11) szokásos írásmódban

$$w_\mu^\times(x) = \sum_\nu S^\times(A)_\mu^\nu w_\nu^\times(Ax + a), \quad (14)$$

egyetlen valós, skalár térre

$$w_n(x_1, \dots, x_n) = w_n(Ax_1 + a, \dots, Ax_n + a). \quad (15)$$

Ha  $A=1$ , akkor a translációs invariancia következményét fejezhetjük ki,

$$w_\mu^\times(f) = w_\mu^\times(L(a, 1)f) = w_\mu^\times(\tau_a f) = \tau_{-a} w_\mu^\times(f), \quad (16)$$

tehát  $w$  transláció invariáns disztribúció. Belátható, hogy az ilyen disztribúció  $n$  számú  $x_i \rightarrow x_{i+1}$ ;  $i=0, \dots, n-1$  változóktól függő mérsékelt disztribúció és konstans az  $n+1$ -ik, pl.  $x_n$  változóban (lásd 1. Függelék), röviden

$$w_\mu^\times(x_0, \dots, x_n) = \mathfrak{W}_\mu^\times(\xi_1, \dots, \xi_{n-1}), \quad \xi_i = x_i - x_{i+1}. \quad (17)$$

IV. *Spektrum feltétel.* Először is definiáljuk  $w$  és  $\mathfrak{W}$  Fourier-transzformáltját. A mérsékelt disztribúciók Fourier-transzformáltja definiálható (2. Függelék), úgy,

$$\tilde{W}_\mu^\times(\mathcal{F}f) = w_\mu^\times(f), \quad f \in \mathbb{S}(M^{n+1}). \quad (18)$$

Az  $f$  Fourier transzformáltja

$$(\mathcal{F}f)(q_0, \dots, q_n) = (2\pi)^{-4(n+1)} \int \exp(-i(q, x)) f(x_0, \dots, x_n). \quad (19)$$

$$dx_0, \dots, dx_n, \quad (q, x) = \sum_{i=1}^n (q_i, x_i).$$

Tudjuk azt, hogy a  $\tilde{W}_\mu^\times$  Fourier-transzformált is mérsékelt disztribúció.  $\mathfrak{W}$  Fourier transzformáltja,  $\mathfrak{W}^\times$  is hasonlóan definiálható.

Szimbólikusan

$$\tilde{W}_\mu^\times(q_0, \dots, q_n) = \int \exp(i(q, x)) w_\mu^\times(x_0, \dots, x_n) dx_0 \dots dx_n, \quad (20)$$

$$\mathfrak{W}_\mu^\times(q_0, \dots, q_{n-1}) = \int \exp(i(q, \xi)) \mathfrak{W}_\mu^\times(\xi_1, \dots, \xi_{n-1}) d\xi_1 \dots d\xi_{n-1}, \quad (21)$$

$$(q, \xi) = \sum_{i=1}^{n-1} (q_i, \xi_i).$$

Minthogy

$$(q, x) = \sum_{i=0}^{n-1} (q_0 + \dots + q_i, \xi_i) + (q_0 + \dots + q_n, x_n), \quad (22)$$

(20)–(22)-ből

$$\tilde{W}_\mu^\times(q_0, \dots, q_n) = (2\pi)^4 \delta(q_0 + \dots + q_n) \tilde{W}_\mu^\times(q_0, \dots, \sum_{i=0}^{n-1} q_i) \quad (23)$$

disztribúció értelemben.

Definíció:  $\tilde{W}$  tartója az a legkisebb  $S$  halmaz, melyen  $f(q)$ -nek és deriváltjainak eltűnése  $\tilde{W}(f)=0$ -t adja.

Jelölje  $V_\pm^m$  a  $p^2 > m^2$  és  $\pm p^0 > 0$  tartományokat,  $\overline{V_\pm^m}$  a megfelelő lezárásokat ( $p^2 = m^2$  hiperboloid felső (alsó) köpenye és afölött (alatt)), 0 az origó impulzustérben, és az előrekúp felülete.

Evidens módon, a

$$\tilde{g}(p) \equiv \int \exp(i(p, a)) g(a) da = 0, \quad (24)$$

$$p \in \overline{V_+^m} \cup \{0\}$$

a

$$\tilde{g}(P) = \int U(a, 1) g(a) da \quad (25)$$

operátor eltűnésére vezet. ( $U$  spektrál alakja!)

A spektrum feltételből következik, hogy 1.  $\tilde{W}_\mu^\times$  tartója a  $\{q | q_0 + \dots + q_i \in \overline{V_+^m} \cup \{0\}; i=0, \dots, n-1; q_0 + \dots + q_n = 0\}$ ,  $q = (q_0, \dots, q_n)$  halmazban van, 2. ha  $q_0 + \dots + q_i = 0$  akkor

$$\tilde{W}_\mu^\times(q_0, \dots, q_n) = \tilde{W}_{\mu_0 \dots \mu_i}^{k_0 \dots k_i}(q_0, \dots, q_i) \tilde{W}_{\mu_{i+1} \dots \mu_n}^{k_{i+1} \dots k_n}(q_{i+1}, \dots, q_n). \quad (26)$$

Lássuk be ezeket az állításokat. Az axiómákból világos a következő.

$$\begin{aligned} G &\equiv (\varphi_{\mu_i}^{-k_i}(f_i) \dots \varphi_{\mu_1}^{-k_1}(f_1) \Psi_0, \tilde{g}(P) \varphi_{\mu_{i+1}}^{k_{i+1}}(f_{i+1}) \dots \varphi_{\mu_n}^{k_n}(f_n) \Psi_0) = \\ &= \int g(a) (U(a, 1)^{-1} \varphi_{\mu_i}^{-k_i}(f_i) \dots U(a, 1) \Psi_0, \varphi_{\mu_{i+1}}^{k_{i+1}}(f_{i+1}) \dots \\ &\dots \varphi_{\mu_n}^{k_n}(f_n) \Psi_0) da = \int g(a) (\Psi_0, \varphi_{\mu_1}^{k_1}(L(-a, 1)f_1) \dots \varphi_{\mu_i}^{k_i}(L(-a, 1) \\ &f_i) \varphi_{\mu_{i+1}}^{k_{i+1}}(f_{i+1}) \dots \varphi_{\mu_n}^{k_n}(f_n) \Psi_0) da = \int g(a) \tilde{W}_\mu^\times(\mathcal{F} L_i(-a, 1)f) da, \end{aligned} \quad (27)$$

ahol

$$(L_i(a, 1)f)(x_0, \dots, x_n) = f(x_0 - a, \dots, x_i - a, x_{i+1}, \dots, x_n), \quad (28)$$

$$(\mathcal{F} L_i(-a, 1)f)(q_0, \dots, q_n) = (\mathcal{F} f)(q_0, \dots, q_n) \exp[i(q_0 + \dots + q_i, a)].$$

Minthogy  $\tilde{W}$  mérsékelt disztribúció, (27) és (28) közvetlenül

$$G = \tilde{W}_\mu^\times((\mathcal{F} f) \cdot \tilde{g}(q_0 + \dots + q_i)) \quad (29)$$

-re vezet. Ha tehát  $q_0 + \dots + q_i$  a spektrumban van és itt  $\tilde{g}=0=(\mathcal{F} f)g$ , és pedig tetszőleges  $f$ -re, akkor a (25) megjegyzés miatt  $G=0$ . Ezzel megvan  $\tilde{W}_\mu^\times$  supportja. (Ha  $\tilde{g}=0$ -t még kisebb halmazon követjük meg, akkor (25) nem áll,  $G \neq 0$ ). Szem-



lélelesen, a Wightman-függvénybe az operátorok közé teljes rendszereket kell betenni, a fellépő mátrixelemek csak az előrekúpban nem tűnnek el.

A második tulajdonság bizonyítására legyen  $p$  a (24)-ben felírt tartományban, de a  $p_\mu = 0$  vákuumállapotot hagyjuk ki. Ezen új tartományban legyen  $\tilde{g}(p) = 0$ , akkor  $\tilde{g}(P) = \tilde{g}(0)E_{\psi_0}$ , és  $E_{\psi_0}$  operátor a vákuumra projektál. (27)–(29) most is igaz, de most  $G$ -ben az előbbi  $\tilde{g}(P)$  szerepel, így  $q_1 + \dots + q_i = 0$ -ra

$$G \equiv \tilde{g}(0)w_{\mu_1 \dots \mu_i}^{k_1 \dots k_i}(f_1 \otimes \dots \otimes f_i)w_{\mu_{i+1} \dots \mu_n}^{k_{i+1} \dots k_n}(f_{i+1} \otimes \dots \otimes f_n) = \tilde{W}_\mu^\times((\mathcal{F}f)\tilde{g}(0)). \quad (30)$$

(30) és (26) ugyanazt állítja. (26)-ot először Hepp, Jost, Ruelle és Steinmann bizonyította 1961-ben valós, skalár térre a következő alakban

$$\int g(a)w_n(x_1, \dots, x_{k-1}, x_k + a, \dots, x_n + a)da = \tilde{g}(0). \quad (31)$$

$$w_{k-1}(x_1, \dots, x_{k-1})w_{n-k+1}(x_k, \dots, x_n).$$

V. Lokális kommutativitás: axiómája eredményezi a

$$w_\mu^\times(f) = w_{\mu_0 \dots \mu_{i+1}}^{k_0 \dots k_{i+1}} w_{\mu_{i+1} \dots \mu_n}^{k_{i+1} \dots k_n} [(i, i+1)f]\sigma(k_i, k_{i+1}) \quad (32)$$

tulajdonságot, ahol  $f(x_0, \dots, x_n) = 0$  ( $x_i - x_{i+1}$ )<sup>2</sup>  $\geq 0$ -ra és

$$[(i, i+1)f](x_0, \dots, x_n) = f(x_0, \dots, x_{i+1}, x_i, \dots, x_n). \quad (33)$$

A (32) tulajdonság szorzat  $f$ -re evidens, abból általános  $f$ -re következik.

A fentiekben megkaptuk az axiómák következtében, a Wightman függvényekre fennálló tulajdonságokat.

Tétel [4, 5]: egy valós, skalár térben  $w_n^{(1)}(x)$  és  $w_n^{(2)}(x)$  elégítse ki a Wightman-függvény minden tulajdonságát (I–V.), akkor minden  $0 \leq \lambda \leq 1$ -re a

$$w_n(x) = \lambda w_n^{(1)}(x) + (1 - \lambda) w_n^{(2)}(x) \quad (34)$$

is Wightman-függvény az I–V. tulajdonságokkal.

Az állítást egyszerűen verifikálhatjuk;  $\lambda$ -ra a megszorítás a pozitív definitésből jön.

[5]-ben látható még: Létezik egy  $\lambda_1$  alsó (vagy  $\lambda_2$  felső, vagy mindkettő) határ, hogy  $\lambda < \lambda_1$  (vagy  $\lambda_2 < \lambda$ , vagy mindkettő)-re a (34) kombináció nem lehet Wightman-függvény.

Ez a tétel a pozitív definités feltételéből következik.

Nincs kizárva, hogy az axiómákból még újabb, fontos, jelenleg rejtett, tulajdonságok következnek.

Az analitikus tulajdonságok tanulmányozására kissé általánosabban fogalmazzuk meg a fenti tulajdonságokat. Jelöljük  $P$ -vel a  $0, \dots, n$  permutációját  $P(0), \dots, P(n)$ -be,  $k_{P(0)}, \dots, k_{P(n)}$ -t  $P\kappa$ -val, ugyanúgy definiáljuk  $P\mu$ -t. Definiáljuk a permutált pontokhoz tartozó Wightman-függvényt,

$$w_{\mu, P}^\times(x_0, \dots, x_n) = \sigma(P, \kappa) w_{P\mu}^{P\kappa}(x_{P(0)}, \dots, x_{P(n)}), \quad (35)$$

ahol

$$\sigma(P, \kappa) = \prod_{\substack{i < j \\ P(i) > P(j)}} \sigma(k_{P(i)}, k_{P(j)}). \quad (36)$$

$\sigma(P, \kappa)$  azzal az előjellel egyezik meg, amely (35) jobb oldalát teljesen térszerű szeparáció esetén  $w_{\mu}^{\kappa}(x_0, \dots, x_n)$ -be viszi. Pontosabban (35):

$$\begin{aligned} w_{\mu, P}^{\kappa}(f) &= w_{P\mu}^{P\kappa}(P^{-1}f)\sigma(P, \kappa), \\ (Pf)(x_0, \dots, x_n) &= f(x_{P(0)}, \dots, x_{P(n)}). \end{aligned} \quad (37)$$

(Szemléletesen, az integrálalakra gondoljunk.) (37)-ből két,  $P, Q$  permutációra

$$w_{\mu, QP}^{\kappa}(f) = w_{Q\mu, P}^{Q\kappa}(Q^{-1}f)\sigma(Q, \kappa). \quad (38)$$

Tulajdonságok:

I. „Hermitikusság:”

$$w_{\mu, P}^{\kappa}(f)^* = w_{\mu, P}^{-\kappa}(f)\sigma(I, \kappa), \quad (39)$$

(lásd (8)-at).

II. Lorentz-kovariancia:

$$w_{\mu, P}^{\kappa}(f) = \sum_{\nu} S^{\kappa}(A^{-1})_{\mu}^{\nu} w_{\nu, P}^{\kappa}(L(a, A)f), \quad (40)$$

(lásd (11)-et).

III. Spektrum-feltétel: Jelölje a  $(P(0), \dots, P(i))$  halmazt  $I(P, i)$  és fix  $P$ -re az  $I(P, i)$ -k halmazát  $(i=0, \dots, n-1)$   $J_P$ , valamint legyen

$$q(I(P, i)) = \sum_{i \in I(P, i)} q_i. \quad (41)$$

Fennáll:  $\tilde{W}_{\mu, P}^{\kappa}(q)$  tartója a  $\{q | q(I(P, i)) \in \overline{V_+^m} U\{0\}; i=0, \dots, n-1; I(P, i) \text{ végigfut } J_P - n; \sum_{i=0}^n q_i = 0\}$  halmazban van. Ugyanis disztribúció értelemben

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\mu, P}^{\kappa}(q) &= \int \exp(i(q, x)) w_{\mu, P}^{\kappa}(x) dx = \sigma(P, \kappa) \int \exp(i \sum_i (q_{P(i)}, x_{P(i)})) \\ &\quad w_{P\mu}^{P\kappa}(x_{P(0)}, \dots, x_{P(n)}) dx_{P(0)} \dots dx_{P(n)} = \sigma(P, \kappa). \end{aligned} \quad (42)$$

$$\tilde{W}_{P\mu}^{P\kappa}(q_{P(0)}, \dots, q_{P(n)}).$$

IV. Lokális kommutativitás: Legyen  $P$  és  $P'$  két permutáció és  $P(i) = P'(i+1)$ ,  $P(i+1) = P'(i)$ ,  $P(j) = P'(j)$   $i \neq j$ -re, röviden  $P' = P(i, i+1)$ , legyen  $f(x_0, \dots, x_n) = 0$  ha  $(x_{P(i)} - x_{P(i+1)})^2 \cong 0$ , akkor

$$w_{\mu, P}^{\kappa}(f) = w_{\mu, P'}^{\kappa}(f), \quad (43)$$

(lásd (32)-t).

## 2. §. A tér rekonstrukciója

A Wightman-féle rekonstrukciós tételt [3, 6] fogjuk bizonyítani. Itt elvi problémát nem veszünk az indexek elhagyásával, ezért egyetlen valós térre szorítkozunk. A tétel kimondása előtt azonban megjegyezzük, hogy a Wightman-axiómákból



még egy tulajdonság következik (bizonyítani fogjuk), amelyet a nyaláb-szétbontásnak nevezhetünk

$$\begin{aligned} \lim_{a \rightarrow \infty} w_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_{j-1} \otimes \tau_a f_j \otimes \dots \otimes \tau_a f_n) = \\ = w_{j-1}(f_1 \otimes \dots \otimes f_{j-1}) w_{n-j+1}(f_j \otimes \dots \otimes f_n). \end{aligned} \quad (44)$$

Itt  $a$  térszerű vektor [7].

**Wightman tétele:** Adjuk meg a  $\{w_n\}$ ,  $n=1, 2, \dots$  mérsékelt disztribúciók rendszerét, ahol  $w_n$  magja  $w_n(x_1, \dots, x_n)$ , úgy, hogy minden  $w_n$  kielégíti az előző részben felsorolt I–V. tulajdonságot, azaz (4), (10), (15), (32)-t és a spektrumfeltételt. Tegyük még fel a nyaláb-szétbontási tulajdonságot, vagyis szimbolikusan

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} [w_n(x_1, \dots, x_j, x_{j+1} + \lambda a, \dots, x_n + \lambda a) - \\ - w_j(x_1, \dots, x_j) w_{n-j+1}(x_{j+1}, \dots, x_n)] = 0, \end{aligned} \quad (45)$$

és  $a$  térszerű vektor. Akkor 1. létezik egy  $\mathcal{H}$  szeparábilis Hilbert-tér, melyen 2.  $\mathcal{P}_+^\dagger$ -nek létezik egy folytonos, unitér  $U(a, \Lambda)$  reprezentációja, 3. létezik egyetlen, a  $\mathcal{P}_+^\dagger$  alatt invariáns  $\psi_0$  állapot (az egyetlenség (45)-ből következik!), 4. létezik egy hermitikus skalár tér a  $D_1$  értelmezési tartománnyal, úgy, hogy a belőle képzett Wightman-függvények reprodukálják  $\{w_n\}$ -et. Valamint 5. erre a konstrukcióra az összes többi Wightman axióma teljesül, az aszimptotikus teljesség kivételével és végül 6., ha  $\mathcal{H}_1$  egy Hilbert tér és azon  $\mathcal{P}_+^\dagger$  folytonos, unitér ábrázolása  $U_1(a, \Lambda)$ , továbbá  $\psi_{01} \in \mathcal{H}_1$  egyetlen  $\mathcal{P}_+^\dagger$ -tel szemben invariáns vektor, és  $\varphi_1(x)$  egy, a  $D_{11} \subset \mathcal{H}_1$ -en értelmezett skalár tér a  $\psi_{01}$  ciklikus vektorral, melynek vákuumértékei  $\mathcal{H}_1$ -ben megegyeznek a kiindulási  $\{w_n\}$  sorozattal, akkor létezik egy  $\mathcal{H}$ -t  $\mathcal{H}_1$ -re leképező unitér,  $V$  operátor a

$$\psi_{01} = V\psi_0, \quad U_1(a, \Lambda) = VU(a, \Lambda)V^{-1} \quad (46)$$

$$\varphi_1(x) = V\varphi(x)V^{-1}, \quad D_{11} = VD$$

tulajdonsággal. Tehát, csak unitér ekvivalens térelméletek konstruálhatók egyetlen  $\{w_n\}$  rendszerből.

A bizonyítás több lépésből áll. Jelölés:  $\mathbb{S}(M)$  elemei  $h(x)$ ,  $\mathbb{S}(M^k)$  elemei  $f_k(x_1, \dots, x_k)$ ,  $g_k(x_1, \dots, x_k)$ .

a) Tekintsük az összes,  $f = (f_0, f_1, f_2, \dots)$ , alakú sorozatot,  $f_0$  komplex szám, csak véges számú  $f_k \neq 0$  legyen. Értelmezzük az összeadást és skalárral való szorzást,

$$(f_0, f_1, \dots) + (g_0, g_1, \dots) = (f_0 + g_0, f_1 + g_1, \dots) \quad (47)$$

$$\alpha(f_0, f_1, \dots) = (\alpha f_0, \alpha f_1, \dots).$$

Az  $f$ -sorozatok egy  $H$ -vektorteret képeznek.  $H$ -ban skalárszorzatot vezetünk be ((4) baloldalát)

$$\begin{aligned} (f, g) = \sum_{j,k=0}^{\infty} w_{j+k}(f^{j+k}), \quad w_0 = 1, f^{j+k}(x_1, \dots, x_{j+k}) = \\ = f_j^*(x_j, \dots, x_1) g_k(x_{j+1}, \dots, x_{j+k}). \end{aligned} \quad (48)$$



(48) valóban kielégíti a skalárszorzatok tulajdonságait, pl.  $w$  hermitikusságából  $(f, g) = (g, f)^*$  stb.  $f$  normája  $\|f\| = (f, f)^{1/2} \geq 0$ .

Definiáljuk a  $\psi_0$ -t, mint  $(1, 0, 0, \dots)$ -t és az  $U(a, A)$  lineáris operátort  $H$ -n

$$U(a, A)(f_0, f_1, f_2, \dots) = (f_0, L(a, A)f_1, L(a, A)f_2, \dots), \quad (49)$$

ahol  $L(a, A)f_k$ -t (12)-vel definiáljuk. Láthatóan  $U(a, A)\psi_0 = \psi_0$ .

Könnyű látni, hogy  $U(a, A)$   $(f, g)$ -t invariánsul hagyja ( $w$  transzformációs szabályából),  $U(a, A)$ -nak van inverze és

$$U(a_1, A_1)U(a_2, A_2) = U(a_1 + A_1a_2, A_1A_2), \quad (50)$$

vagyis  $U(a, A)$  a  $\mathcal{P}^1$ -t ábrázolja  $H$ -n, és pedig unitér módon.

Definiáljuk akármelyik  $h \in \mathbb{S}(M)$ -re a  $\varphi(h)$  lineáris operátort

$$\varphi(h)(f_0, f_1, f_2, \dots) = (0, hf_0, h \otimes f_1, h \otimes f_2, \dots). \quad (51)$$

$$(h \otimes f_k)(x_1, \dots, x_{k+1}) = h(x_1)f_k(x_2, \dots, x_{k+1}) \in \mathbb{S}(M^{k+1}).$$

$\varphi(h)$  Lorentz-transzformációkor kielégíti

$$U(a, A)\varphi(h)U(a, A)^{-1} = \varphi(L(a, A)h), \quad (52)$$

ugyanis

$$\begin{aligned} U(a, A)\varphi(h)(f_0, f_1, \dots) &= U(a, A)(0, hf_0, h \otimes f_1, \dots) = \\ &= (0, L(a, A)hf_0, L(a, A)h \otimes L(a, A)f_1, \dots) = \\ &= \varphi(L(a, A)h)(f_0, L(a, A)f_1, \dots) = \\ &= \varphi(L(a, A)h)U(a, A)(f_0, f_1, \dots). \end{aligned} \quad (53)$$

Evidens, hogy  $(f, \varphi(h)g)$ , mint  $h$  funkcionálja, mérsékelt disztribúció és  $\varphi(h)$  hermitikus

$$(\varphi(h^*)f, g) = (f, \varphi(h)g) \quad (54)$$

b)  $\|f\| = 0$ -t több vektor is kielégíti az  $f = 0$ -on kívül. Jelölje  $H_0 \subset H$  a 0-normájú vektorok alterét, ebben minden vektor ortogonális minden más  $H$ -beli vektorra, mert a Schwartz-egyenlőtlenség

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\| \quad (55)$$

fennáll. Ezért, ha  $f, g \in H_0$ , lineárkombinációjuk is  $H_0$ -ban van. Alkossuk meg az  $f$ -sorozatok ekvivalencia osztályait,  $\tilde{f}$ . Egy ekvivalencia osztályban az egymástól 0-normájú sorozatban különböző  $f$ -ek vannak. Definiáljuk az  $\tilde{f}, \tilde{g}$  ekvivalencia osztályok lineárkombinációját,  $\alpha\tilde{f} + \beta\tilde{g}$ . Ez legyen az  $\alpha f + \beta g$ -t tartalmazó ekvivalencia osztály,  $f \in \tilde{f}, g \in \tilde{g}$ . A konstrukció reprezentánstól független. Az  $\tilde{f}$ -ek összege vektor teret alkot, a  $H/H_0$  (faktor) teret.  $H/H_0$ -ban a skalárszorzat legyen  $(\tilde{f}, \tilde{g}) = (f, g)$  ((55) miatt reprezentáns független).  $H/H_0$ -ban a 0-elem  $\tilde{f} = 0$ , az  $\|f\| = 0$ -val ekvivalens  $f$ -sorozatokból áll.  $\|\tilde{f}\| = 0$  az  $\tilde{f} = 0$ -ra vezet.

$H/H_0$ -on  $U(a, A)$ ,  $\varphi(h)$ -t az  $f$ -ekre való hatásukon keresztül definiálunk,  $\varphi(h)\tilde{f} = (\varphi(h)f, \dots)$ , stb.  $U(a, A)$ ,  $\varphi(h)$   $\tilde{f}$ -hez  $\tilde{f'} \in H/H_0$ -t rendel. Ugyanis legyen  $f, g \in \tilde{f}$ , akkor

$$\|U(a, A)f - U(a, A)g\| = \|U(a, A)(f - g)\| = \|f - g\| = 0, \quad (56)$$



tehát  $U(a, A)f, U(a, A)g \in \tilde{f} \in H/H_0$ . Ugyanez áll  $\varphi(h)$ -ra is, minthogy  $f - g \rightarrow f$ ,  $\|f\| = 0$ -al:

$$(\varphi(h)f, \varphi(h)f) = (f, \varphi(h^*)\varphi(h)f) \equiv \|f\| \cdot \|\varphi(h^*)\varphi(h)f\| = 0. \quad (57)$$

A továbbiakban az operátorokat változtatás nélkül jelöljük.

c) A  $H/H_0$  még nem teljes, tegyük teljessé (3. Függelék). Ekkor egy  $\mathcal{H}$  Hilbert-térre jutunk.  $\mathcal{H}$ -ban helyet foglal  $H/H_0$  is. Ugyanis  $f \in H/H_0$ -al  $\mathcal{H}$ -ban a  $\psi_{\tilde{f}}$  vektort azonosítjuk,  $\psi_{\tilde{f}}$  az  $\{\tilde{f}, \tilde{f}, \dots\}$  Cauchy-sorozat ekvivalencia osztálya. Világos, hogy  $(\psi_{\tilde{f}}, \psi_{\tilde{g}}) = (\tilde{f}, \tilde{g}) = (f, g)$ . (Ugyanúgy jelöltük a skalár-szorzatokat.) A  $\psi_{\tilde{f}}$ -ek halmazát  $D_1 \subset \mathcal{H}$ -nak nevezzük.  $D_1$  sűrű  $\mathcal{H}$ -ban. Ugyanis ha  $\Phi \in \mathcal{H}$  és  $\Phi$  reprezentáns Cauchy-sorozata  $\{\tilde{f}_n\}$ , akkor  $\|\Phi - \psi_{\tilde{f}_n}\| = \lim_{m \rightarrow \infty} \|f_m - f_n\| < \varepsilon$ .  $D_1$ -ben van egy megszámlálható,  $\mathcal{H}$ -ban sűrű halmaz, így  $\mathcal{H}$  szeparábilis. Ugyanis, a háromszögegyenlőtlenség (fennáll!) miatt elég a  $\psi_{\tilde{f}} \in D_1$ -ekhez találni a megszámlálható halmazból tetszőleges közeli  $\psi_{\tilde{f}_e}$  vektorokat; azonban a

$$\|\Psi_{\tilde{f}} - \Psi_{\tilde{f}_e}\| = \|\tilde{f} - \tilde{f}_e\| = \|f - f_e\| \quad (58)$$

véges számú folytonos funkcionál összege (lásd (48)!), így tetszőleges kicsivé tehető, hacsak  $(f_j - f_j^c) \rightarrow 0$ . Utóbbi mindig teljesül, minthogy  $\mathbb{S}(M^J)$  szeparábilis, azaz létezik benne egy mindenütt sűrű, megszámlálható  $(f_j^c)$  függvényhalmaz. Az  $(f_j^c)$  halmaz lényegében polinomok és akárhányszor deriválható, csökkenő függvények szorzataiból áll, melyek *Weierstrass* tétele szerint tetszőlegesen megközelítik  $\mathbb{S}(M^J)$  elemeit.

d)  $U(a, A)$  definícióját  $H/H_0$ -ról triviálisan kiterjesztjük  $D_1$ -re,  $U\psi_{\tilde{f}} = \psi_{U\tilde{f}}$ , sőt

$$\|U(a, A)\psi_{\tilde{f}} - U(a, A)\psi_{\tilde{g}}\| = \|\psi_{\tilde{f}} - \psi_{\tilde{g}}\|, \quad (59)$$

$U(a, A)$  folytonos  $D_1$ -en, s a többi tulajdonságai is megmaradnak.  $U(a, A)$ -t a folytonosság segítségével  $D_1$ -ről  $\mathcal{H}$ -ra terjesztjük ki: ha  $\psi_{\tilde{f}_n} \rightarrow \Phi$ , akkor  $U(a, A)\psi_{\tilde{f}_n} \rightarrow U(a, A)\Phi$ . Ha még  $\psi_{\tilde{g}_n} \rightarrow \chi$ , akkor

$$(U(a, A)\Phi, U(a, A)\chi) = \lim_{m, n \rightarrow \infty} (U(a, A)\psi_{\tilde{f}_n}, U(a, A)\psi_{\tilde{g}_m}) = (\Phi, \chi), \quad (60)$$

így  $U(a, A)$  unitér ábrázolás.

$U(a, A)$  az  $(a, A)$ -ban folytonos. Ezt elég bebizonyítani a  $(0, 1)$  környezetében, mert

$$\|U(a_1, A_1)\psi - U(a_2, A_2)\psi\| = \|\psi - U((a_1, A_1)^{-1}(a_2, A_2))\psi\|. \quad (61)$$

Egyrésről

$$\|\psi_{\tilde{f}} - U(a, A)\psi_{\tilde{f}}\| = \|\tilde{f} - U(a, A)\tilde{f}\|, \quad (62)$$

a jobb oldal pedig  $(a, A) \rightarrow (0, 1)$ -re 0-hoz tart, minthogy  $w$ -kel,  $f_k$ ,  $L(a, A)f_j$ -kel fejezhető ki, és  $L(a, A)f_j - f_j \rightarrow 0$  az  $(0, 1)$  egységelemhez tartva, az  $\mathbb{S}$ -ben. Másrésről akármelyik  $\psi \in \mathcal{H}$ -ra:

$$\begin{aligned} \|\psi - U(a, A)\psi\| &= \|(\psi - \psi_{\tilde{f}}) + (\psi_{\tilde{f}} - U(a, A)\psi_{\tilde{f}}) + \\ &+ U(a, A)(\psi_{\tilde{f}} - \psi)\| \leq 2\|\psi - \psi_{\tilde{f}}\| + \|\psi_{\tilde{f}} - U(a, A)\psi_{\tilde{f}}\| \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (63)$$

ha  $(a, A) \rightarrow (0, 1)$ ,  $\psi_{\tilde{f}} \rightarrow \psi$ .



Az  $U(a, A)$  egy invariáns vektorral,  $\psi_0$ , rendelkezik.  $\psi_0 \in D_1$  az  $\{\tilde{f}, \tilde{f}, \dots\}$  Cauchy-sorozat ekvivalencia osztálya, ahol  $\tilde{f} \in H/H_0$  az  $(1, 0, 0, \dots)$  sorozat ekvivalencia osztálya. Világos, hogy  $\psi_0$  invariáns. Lássuk be, hogy  $\psi_0$  az egyetlen, invariáns vektor. Ezért tételezzük fel, hogy  $\psi_0$  mellett van egy lineárisan független  $\psi'_0$  is. Feltehető  $\|\psi'_0\| = 1$ ,  $(\psi'_0, \psi_0) = 0$ . Ha  $\psi'_0 \psi_{\tilde{f}}$  típusú volna, akkor

$$(\psi'_0, \psi_0) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} (\psi'_0, U(\lambda a, 1)\psi'_0) = (\psi'_0, \psi_0)(\psi_0, \psi'_0) = 0 \quad (64)$$

a (45) alatti nyaláb-szétbontási tulajdonságot felhasználva; általában

$$\begin{aligned} (\psi_{\tilde{f}}, U(\lambda a, 1)\psi_{\tilde{f}}) &= ((f_0, f_1, \dots), (f_0, L(\lambda a, 1)f_1, \dots)) \rightarrow \\ &\rightarrow (\psi_{\tilde{f}}, \psi_0)(\psi_0, \psi_{\tilde{f}}). \end{aligned} \quad (65)$$

Marad az a lehetőség, hogy  $\psi'_0$  nem  $\psi_{\tilde{f}}$  alakú; még mindig van oly  $\psi_{\tilde{f}}$ , hogy  $\|\psi'_0 - \psi_{\tilde{f}}\| < \varepsilon$ ,  $\|\psi_{\tilde{f}}\| = 1$  választható. Fennáll

$$\begin{aligned} (\psi'_0, \psi'_0) &= \lim_{\lambda \rightarrow \infty} [(\psi'_0 - \psi_{\tilde{f}}, U(\lambda a, 1)\psi'_0) + \\ &+ (\psi_{\tilde{f}}, U(\lambda a, 1)(\psi'_0 - \psi_{\tilde{f}})) + (\psi_{\tilde{f}}, U(\lambda a, 1)\psi_{\tilde{f}})]. \end{aligned} \quad (66)$$

(65) segítségével

$$|(\psi'_0, \psi'_0) - (\psi_{\tilde{f}}, \psi_0)(\psi_0, \psi_{\tilde{f}})| \leq 2\varepsilon. \quad (67)$$

Minthogy

$$|(\psi_{\tilde{f}}, \psi_0)| = |(\psi_{\tilde{f}} - \psi'_0, \psi_0)| \leq \|\psi_{\tilde{f}} - \psi'_0\| < \varepsilon, \quad (68)$$

következik

$$(\psi'_0, \psi'_0) \leq (\psi_{\tilde{f}}, \psi_0)(\psi_0, \psi_{\tilde{f}}) + |(\psi'_0, \psi'_0) - (\psi_{\tilde{f}}, \psi_0)(\psi_0, \psi_{\tilde{f}})| \leq 2\varepsilon + \varepsilon^2. \quad (69)$$

$\psi_0$  és  $\psi'_0$  nem lehetnek lineárisan függetlenek,  $\psi_0$  egyetlen.  $U(a, A)$  négyesimpulzus spektruma az előrekúpban, vagy azon van, hiszen csak ott

$$\int g(a)(\Phi, U(a, 1)\psi) da \neq 0. \quad (70)$$

(70) a spektrum-feltételből és a skalárszorzat definíciójából következik. ( $w$ -k jelennek meg.)

e)  $\varphi(h)$ -t minden  $\tilde{g} \in H/H_0$ -ra definiáltuk. Defináljuk  $\varphi(h)$ -t  $D_1$ -en:  $\varphi(h)\psi_{\tilde{g}} = \psi_{h \otimes \tilde{g}}$ , ahol  $h \otimes \tilde{g}$  a  $(0, hg_0, h \otimes g_1, h \otimes g_2, \dots)$  sorozat ekvivalencia osztálya és  $g \in \tilde{g}$ .  $D_1$  lineáris tér,  $\varphi(h)$  lineáris operátor rajta. Jelölje  $K$  a  $(\varphi(h_j)$  polinom)  $\psi_0$  vektorok halmazát,  $K \subset D_1$ . Láthatóan

$$w_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) = (\psi_0, \varphi(f_1) \dots \varphi(f_n)\psi_0), \quad (71)$$

$$\varphi(h)D_1 \subset D_1, \quad \psi_0 \in D_1, \quad U(a, A)D_1 \subset D_1.$$

Ezért  $D_1$ -et azonosítjuk  $\varphi$  értelmezési tartományával. A  $(\psi_{\tilde{g}}, \varphi(h)\psi_{\tilde{f}})h$ -ban mérsékelt disztribúció. (58)-hoz hasonló megfontolással nem nehéz látni, hogy  $K$  sűrű  $D_1$ -ben,  $\psi_0$  ciklikus.



Az (54) hermitikusság  $D_1$ -en is igaz, mert

$$(\varphi(h^*)\psi_{\tilde{g}}, \psi_{\tilde{f}}) = (\psi_{h^* \otimes \tilde{g}}, \psi_{\tilde{f}}) = (h^* \otimes \tilde{g}, \tilde{f}) = (\varphi(h^*)g, f), \quad (72)$$

$$(\psi_{\tilde{g}} \Phi(h)\psi_{\tilde{f}}) = (\tilde{g}, h \otimes \tilde{f}) = (g, \varphi(h)f).$$

Átvihető az (52) transzformációs tulajdonság  $D_1$ -re is

$$\begin{aligned} U(a, \Lambda)\varphi(h)\psi_{\tilde{g}} &= \psi_{L(a, \Lambda)h \otimes L(a, \Lambda)g} = \varphi(L(a, \Lambda)h)\psi_{L(a, \Lambda)g} = \\ &= \varphi(L(a, \Lambda)h)U(a, \Lambda)\psi_{\tilde{g}}. \end{aligned} \quad (73)$$

Hasonlóan verifikálhatjuk a lokális kommutativitást  $(\varphi(h)\varphi(h') - \varphi(h')\varphi(h))\psi_{\tilde{f}}$  normáját vizsgálva.

f) Végül, a 6. tulajdonságot bizonyítjuk. Tegyük fel a 6. tulajdonság feltételeit. Ekkor a  $\psi_{\tilde{f}} \in D_1$ -hez egy  $\psi_{1\tilde{f}} \in \mathcal{H}_1$  rendelhető egy  $V$ ,

$$\begin{aligned} V\psi_{\tilde{f}} &= \psi_{1\tilde{f}} = f_0\psi_{01} + \varphi_1(f_1)\psi_{01} + \int \varphi_1(x_1)\varphi_1(x_2)f_2(x_1, x_2) \\ &\quad dx_1 dx_2 \psi_{01} + \dots \end{aligned} \quad (73)$$

leképezéssel. Itt  $(f_0, f_1, \dots)$  az  $\tilde{f}$  ekvivalenciaosztályba tartozik, (73) reprezentáns független.  $V$  unitér, minthogy

$$(V\psi_{\tilde{f}}, V\psi_{\tilde{g}}) = (\psi_{1\tilde{f}}, \psi_{1\tilde{g}}) = (\psi_{\tilde{f}}, \psi_{\tilde{g}}), \quad (73)$$

kihasználva a közös Wightman-függvények létezését.  $V$  a folytonosság segítségével unitér operátorként az egész  $\mathcal{H}$  és  $H_1$ -re is kiterjeszthető.

Legyen  $\psi_{\tilde{f}} \in D_1$ , akkor

$$\begin{aligned} V\varphi(h)\psi_{\tilde{f}} &= V\psi_{h \otimes \tilde{f}} = \varphi_1(hf_0)\psi_{01} + \varphi_1(h)\varphi_1(f_1)\psi_{01} + \dots = \\ &= \varphi_1(h)[f_0\psi_{01} + \varphi_1(f_1)\psi_{01} + \dots] = \varphi_1(h)V\psi_{\tilde{f}}. \end{aligned} \quad (74)$$

Innen  $D_{11} = VD_1 \subset \mathcal{H}_1$  minden vektorára  $\varphi_1(h) = V\varphi(h)V^{-1}$ . Ugyanígy  $U_1(a, \Lambda) = VU(a, \Lambda)V^{-1}$ .

Ezzel a rekonstrukció teljes. A tétel a 2. §-beli általános esetben analóg módon bizonyítható. Az analitikus tulajdonságok vizsgálata után folytatjuk a téroperátorok és állapotok  $(\psi_0!)$  különféle tulajdonságai közti összefüggések tanulmányozását.

## 1. FÜGGELÉK

1. *Schwartz mag tétele* [8]. A következők mind az  $\mathbb{S}^*$ , mind a  $\mathbb{D}^*$  téren fennállnak. Ha adott egy  $T$  disztribúció az  $f_1(x), \dots, f_n(x)$  változókkal (azaz lineáris folytonos funkcionál a kiszemelt  $f_j(x)$  változóban ( $j=1, \dots, n$ ), a többi  $f_k$  fix), akkor várjuk, hogy legyen egy  $G$  disztribúció, mely az  $f(x_1, \dots, x_n)$  próbafüggvények téren van értelmezve és  $T(f_1, \dots, f_n) = G(f_1, \dots, f_n)$ . Erre a problémára ad igénylő választ a mag-tétel. Ezt bizonyítás nélkül a következőkben foglalhatjuk össze.

A  $\mathfrak{D}(R^n)$ -ből  $\mathfrak{D}(R^m)^*$ -ba való lineáris, folytonos leképezések  $J$  tere algebrai és topológiai értelemben egyenlő a  $\mathfrak{D}(R^n \times R^m)^* \equiv \mathfrak{D}_{xy}^*$  térrel.

(Ha  $T \in \mathfrak{D}_{xy}^*$ , akkor ehhez könnyű egy  $u_T \in J$ -t rendelni. Ha  $f \in \mathfrak{D}_x$ ,  $g \in \mathfrak{D}_y$ -hoz hozzárendeljük a  $(T, fg) = (u_T(f), g)$ ,  $u_T(f) \in \mathfrak{D}_y^*$  disztribúciót. Könnyű látni, hogy  $f \rightarrow u_T(f) \in J$ . Minden  $T$ -hez egy  $u_T$  tartozik.  $\mathfrak{D}_{xy}^*$  topológiája megegyezik a  $J$  által indukált topológiával. Az is belátható, hogy minden  $u \in J$ -hez van egy  $T \in \mathfrak{D}_{xy}^*$  úgy, hogy  $u = u_T$ ,  $T$  az  $u$  magja.) Ugyanez igaz  $\mathbb{S}^*$ -ra is.

2. *Transzláció invariáns disztribúciók*: Az  $(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (x_1 + a, \dots, x_n + a)$  eltolás alatt invariáns  $T$  disztribúció az  $(x_1 - x_2, \dots, x_{n-1} - x_n)$  változóknál disztribúció. Hajtsuk végre az

$$(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (X, \xi_1, \dots, \xi_n) \quad (1)$$

$$X = \frac{1}{n}(x_1 + \dots + x_n)$$

$$\xi_i = x_i - x_{i+1}, \quad i = 1, \dots, n-1$$

helyettesítést, akkor  $T = T_1$ ,  $T_1$  invariáns az  $(X, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}) \rightarrow (X + a, \xi_1, \dots, \xi_{n-1})$  helyettesítésre vonatkozóan. [1]-ből tudjuk, hogy  $T_1$   $X_\mu$  szerinti deriváltjának el kell tűnnie. Megfordítva, ha ez a derivált eltűnik,  $T_1$  csak  $\xi$ -től függ. Ugyanis rögzítsük az  $f_0 \in \mathbb{S}$ -et úgy, hogy  $\int f_0(X) dX = 1$  és definiáljuk  $\varphi \in \mathbb{S}$ -re:

$$\chi(X, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}) = f(X, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}) - f_0(X) \int dy f(y, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}), \quad (2)$$

akkor

$$\chi \in \mathbb{S}, \quad \int \chi(y, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}) dy = 0. \quad (3)$$

Egy ilyen  $\chi$ -re mindig igaz

$$\chi = \frac{\partial^4 \chi_1}{\partial X_0 \dots \partial X_3}, \quad (4)$$

$$\chi_1(X, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}) = \int_{-\infty}^{X_0} \int_{-\infty}^{X_3} dy \chi(y, \xi_1, \dots, \xi_{n-1}),$$

$$T_1(\chi) = 0.$$

Végül

$$\begin{aligned} T_1(f) &= T_1(f_0(X) \int dy f(y, \xi_1, \dots, \xi_{n-1})) = T'( \int dy f(y, \xi_1, \dots, \xi_{n-1})) = \\ &= T'(g(\xi_1, \dots, \xi_{n-1})). \end{aligned} \quad (5)$$

## 2. FÜGGELÉK

1. *Mérsékelt disztribúció Fourier-transzformáltja* [8].  $f(x) \in \mathbb{S}$  Fourier-transzformáltján értjük az

$$\mathcal{F}f(x) = \hat{f}(x) = \int e^{-2\pi ixy} f(y) dy \quad (6)$$



függvényt,  $xy$  két  $R^n$ -beli vektor skalárszorzata. Egyszerűen verifikálható, hogy  $\hat{f}(x) \in \mathbb{S}$  Pl.  $|x_\alpha D^\beta \hat{f}(x)| \rightarrow 0$ , ha  $|x| \rightarrow \infty$ , mert a Riemann–Lebesgue-tétel értelmében bármilyen integrálható függvény Fourier transzformáltja  $\rightarrow 0$ ,  $x \rightarrow \pm \infty$ -re. Az  $\mathcal{F}$  lineáris művelet, mely  $\mathbb{S}$ -et  $\mathbb{S}$ -re képezi le. Sőt  $\mathcal{F}$  az  $\mathbb{S}$ -nek egy-egyértelmű és folytonos leképezése  $\mathbb{S}$ -re. Hogy kell az  $\mathcal{F}$  transzformációt  $\mathbb{S}^*$ -on definiálni? Ha  $f(x)$  függvény  $\in \mathbb{S}$ , akkor az  $(f, \varphi')$  disztribúció  $\in \mathbb{S}^*$ ,  $\varphi' \in \mathbb{S}$  rendelhető hozzá. Az  $f$ -disztribúció Fourier-transzformáltját viszont evidens módon  $(\mathcal{F}f(x), \varphi(x)) = (f(y)\mathcal{F}\varphi(y))$ -val értelmezzük,  $\varphi \in \mathbb{S}$ . Az  $\mathcal{F}f$  disztribúció  $\in \mathbb{S}^*$ .

A  $T \in \mathbb{S}^*$  Fourier-transzformáltján értjük azt az  $\mathcal{F}T \in \mathbb{S}^*$  disztribúciót, melyre

$$(\mathcal{F}T, \varphi) = (T, \mathcal{F}\varphi) \quad \varphi \in \mathbb{S}. \quad (7)$$

Belátható, hogy  $\mathcal{F}$  folytonosan képezi le az  $\mathbb{S}^*$ -ot önmagára.

Példák (7)-re: 1.  $\mathcal{F}\delta = 1$ , ugyanis

$$(\mathcal{F}\delta(x); \varphi(x)) = (\delta(y), \mathcal{F}\varphi(y)) = \hat{\varphi}(0) = (1, \varphi(x)) \quad (8)$$

2.

$$\mathcal{F}(D^p T) = (2\pi i x)_p \mathcal{F}T, \quad (9)$$

mert

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}(D^p T)(x), \varphi(x)) &= ((D^p T)(y), \mathcal{F}\varphi(y)) = (-1)^p (T(y), D^p \mathcal{F}\varphi(y)) = \\ &= (-1)^p (T(y), \mathcal{F}((-2\pi i y)_p \varphi)(y)) = ((2\pi i x)_p \mathcal{F}T(x), \varphi(x)). \end{aligned} \quad (10)$$

3.

$$\mathcal{F}((-2\pi i x)_p T) = D^p(\mathcal{F}T). \quad (11)$$

4.

$$\mathcal{F}(T(x-a)) = \exp(-2\pi i a x) \mathcal{F}T, \quad (12)$$

mert

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}T(x-a), \varphi(x)) &= (T(y), \hat{\varphi}(y+a)) = (T(y), \mathcal{F}(e^{-2\pi i a y} \varphi(y))) = \\ &= (e^{-2\pi i a x} \mathcal{F}(T), \varphi). \end{aligned} \quad (13)$$

5.

$$\mathcal{F}(\exp(2\pi i a x) T) = (\mathcal{F}T)(x-a). \quad (14)$$

6. Fundamentális lemma:

$$\mathcal{F}(\exp(2\pi i a x)) = \delta(x-a). \quad (15)$$

(15) az  $\mathcal{F}(1) = \delta$  és (14)-ből következik.  $\mathcal{F}(1) = \delta$  belátása: Legyen (9)-ben  $T=1$ , akkor

$$0 = ((2\pi i x)_p \mathcal{F}(1), \varphi) = (\mathcal{F}(1), (2\pi i x)_p \varphi), \quad \varphi \in \mathbb{S} \text{ tetszőleges.} \quad (16)$$

Az egyedüli nemtriviális disztribúció, ami egy (16) alakú egyenletet kielégíti, a  $c\delta$ ; lássuk be, hogy  $c=1$ . Ugyanis

$$(c\delta, \varphi) = c\varphi(0) = (1, \mathcal{F}\varphi) \quad (17)$$

és válasszuk  $\varphi$ -t  $\varphi = \exp(-\pi x^2)$ ,  $\varphi = \hat{\varphi}$ . Nem tételeztük fel a Fourier-inverziós képletet.

7. Fundamentális tétel: Ha  $f \in \mathbb{S}$ , akkor

$$f(y) = \int \exp(2\pi i x y) \hat{f}(x) dx. \quad (18)$$

$\mathbb{S}$ -ben (6) a (18) szerint fordítható meg. Ugyanis (15)-ből bármilyen  $a$ -ra

$$f(a) = (\mathcal{F}(\exp(2\pi i a x)), f) = (\exp(2\pi i a x), \hat{f}). \quad (19)$$

## 3. FÜGGELÉK

1. *Nem teljes Hilbert-tér teljessé tétele* [9]. Nem teljes, vagy pre-Hilbert téren értünk egy  $h$  Hilbert teret, amelyben hiányzik a teljesség. A teljesség (a normára vonatkozóan) azt jelenti, hogy minden  $h$ -beli Cauchy-konvergens sorozatnak (Cauchy-sorozat) van határértéke a  $h$ -ban. Jelöljön  $\{f_n\} \in h$  Cauchy-sorozatot, definíció szerint  $\|f_n - f_{n+p}\| \leq \varepsilon_n$  és  $p > 0$ ,  $n \rightarrow \infty$ -re  $\varepsilon_n \rightarrow 0$ .  $\{f_n\}$  és  $\{g_n\}$ -et ekvivalenseknek nevezük,  $\{f_n\} \sim \{g_n\}$ , ha  $n \rightarrow \infty$ -re  $\|f_n - g_n\| \rightarrow 0$ . Az ekvivalencia tulajdonságai

$$\begin{aligned} 1. \quad & \{f_n\} \sim \{f_n\} \\ 2. \quad & \{f_n\} \sim \{g_n\} \Rightarrow \{g_n\} \sim \{f_n\} \\ 3. \quad & \{f_n\} \sim \{g_n\} \sim \{h_n\} \Rightarrow \{f_n\} \sim \{h_n\} \\ & (\|f_n - h_n\| \leq \|f_n - g_n\| + \|g_n - h_n\|). \end{aligned} \quad (20)$$

(20) alapján  $h$  Cauchy-sorozatokat ekvivalencia osztályokba rendezhetjük. Az  $[\{f_n\}]$  ekvivalencia osztályban az  $\{f_n\}$ -nel ekvivalens sorozatok összessége van. Egy  $\{f_n\}$  csak egy osztályban lehet.  $\mathfrak{H}$  jelentse az ekvivalencia osztályok együttesét. Megmutatjuk, hogy  $\mathfrak{H}$ -n Hilbert-tér szerkezet definiálható, a teljesség is fennáll.

$h$ -t a  $\mathfrak{H}$ -ba helyezhetjük, ugyanis legyen  $f \in h$  és az  $\{f_n = f\}$ -hoz tartozó osztály legyen  $[f]$ . Minden  $f$ -hez egy  $[f] \in \mathfrak{H}$  tartozik.  $f \in h$ -t  $\mathfrak{H}$  elemének tekintjük.

$\mathfrak{H}$ -t, mint lineáris vektorteret definiáljuk: 1.  $\alpha[\{f_n\}] = [\{\alpha f_n\}] \in \mathfrak{H}$ , 2.  $[\{f_n\}] + [\{f'_n\}] = [\{f_n + f'_n\}] \in \mathfrak{H}$ , mert

$$\begin{aligned} \{f_n\} \sim \{g_n\} \\ \{f'_n\} \sim \{g'_n\} \end{aligned} \Rightarrow \{f_n + f'_n\} \sim \{g_n + g'_n\}. \quad (21)$$

Ezek a tulajdonságok a  $\mathfrak{H}$ -n automatikusan megvannak.  $h$  altere  $\mathfrak{H}$ -nak.

Definiáljunk  $h$ -n egy  $h$  minden résztartományában egyenletesen folytonos  $\varphi(f, g)$  függvényt; azaz minden  $\varepsilon > 0$ -hoz megadott  $A > 0$ -hoz van oly  $\eta$ , hogy

$$\|f - f'\|, \|g - g'\| < \eta \Rightarrow |\varphi(f, g) - \varphi(f', g')| < \varepsilon \quad (22)$$

minden  $f, g, f', g' \in h$ ,  $\|f\|, \dots, \|g'\| < A$ -ra.

$\varphi(f, g)$  definícióját  $\mathfrak{H}$ -ra terjesztjük ki,

$$\varphi([\{f_n\}], [\{g_n\}]) = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(f_n, g_n). \quad (23)$$

Ez értelmes, mert a  $\varphi(f_n, g_n)$  számsorozat Cauchy-sorozat, ugyanis legyen  $f = f_n$ ,  $g = g_n$ ,  $f' = f_{n+p}$ ,  $g' = g_{n+p}$  (22)-ben (a Cauchy-sorozatok korlátosak!), és így  $\varphi(f_n, g_n)$  konvergens. Másrészt (23) jobb oldala reprezentáns független: ha  $\{f_n\} \sim \{f'_n\}$ ,  $\{g_n\} \sim \{g'_n\}$  akkor  $\varphi(f_n, g_n) - \varphi(f'_n, g'_n) \rightarrow 0$ , ha  $n \rightarrow \infty$  ( $f = f_n$ ,  $g = g_n$ ,  $f' = f'_n$ ,  $g' = g'_n$ ). (23)  $f, g \in h \subset \mathfrak{H}$ -ra  $\varphi(f, g)$ -t adja vissza.

$h$ -n az  $(f, g)$  skalárszorzat egy  $\varphi$ -függvény, mert

$$\begin{aligned} |(f + h, g + k) - (f, g)| & \leq |(f, h)| + |(h, g)| + |(h, k)| \leq \\ & \leq \|f\| \cdot \|h\| + \|g\| \cdot \|h\| + \|h\| \cdot \|k\|. \end{aligned} \quad (24)$$



Ezért a skalárszorzat definícióját a teljes  $\mathfrak{H}$ -ra (23)-on keresztül terjeszthetjük ki

$$([\{f_n\}], [\{g_n\}]) = \lim_{n \rightarrow \infty} (f_n, g_n). \quad (25)$$

Verifikálható, hogy (25) a szükséges tulajdonságokat teljesíti. Az  $([\{f_n\}], [\{f_n\}]) = 0$ -ra  $\lim_{n \rightarrow \infty} (f_n, f_n) = 0$ , azaz  $n \rightarrow \infty$ -re  $\|f_n - 0\| \rightarrow 0$ . Így  $\mathfrak{H}$ -ban a 0-elemet az  $f_n \rightarrow 0$  Cauchy sorozattal ekvivalens sorozatok osztálya,  $[\{f_n\}] = 0$  definiálja. ( $0 \in h$ -hoz tartó ekvivalens sorozatok).

$\mathfrak{H}$  teljes. Jelöljön  $f^n = [\{f_k^n; k = 1, 2, \dots\}]$  egy Cauchy-sorozatot  $\mathfrak{H} - n$ ,  $\|f^n - f^{n+p}\| < \varepsilon_n$ ,  $n \rightarrow \infty$ -re  $\varepsilon_n \rightarrow 0$ . Azt állítjuk, hogy  $f^n$  normában  $\mathfrak{H}$ -beli elemhez tart.

Megjegyzés: ha  $f = [\{f_n\}] \in \mathfrak{H}$ , akkor  $\|f_n - f\| \rightarrow 0$   $\mathfrak{H}$ -ban, ha  $n \rightarrow \infty$ .  $[f_n]$ , mint eddig  $f_n \in h$ -t reprezentálja. Ugyanis,

$$\|f_n - f\|^2 = \lim_{k \rightarrow \infty} (f_n - f_k, f_n - f_k) = \lim_{p \rightarrow \infty} \|f_n - f_{n+p}\|^2 < \varepsilon_n^2 \quad (26)$$

Lássuk be  $\mathfrak{H}$  teljességét. A megjegyzést  $f = f^n$ -re alkalmazva: minden  $n$ -hez van oly  $k_n$ , hogy  $\|f_{k_n}^n - f^n\| < 2^{-n}$ . Tekintsük a  $\{f_{k_n}^n\}$  sorozatot,  $f_{k_n}^n \in h$ . Ez Cauchy-sorozat, hiszen

$$\begin{aligned} \|f_{k_n}^n - f_{k_{n+p}}^{n+p}\| &= \|f_{k_n}^n - [f_{k_{n+p}}^{n+p}]\| \leq \|f_{k_n}^n - f^n\| + \|f^n - f^{n+p}\| + \\ &+ \|[f_{k_{n+p}}^{n+p}] - f^{n+p}\| \leq 2^{-n} + \varepsilon_n + 2^{-n-p} \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (27)$$

Állítás:  $n \rightarrow \infty$ -re  $f^n$  tart  $f = [\{f_{k_n}^n\}] \in \mathfrak{H}$ -hoz. Ugyanis  $i > n$ -re

$$\begin{aligned} \|f^n - f\| &\leq \|f^n - [f_{k_n}^n]\| + \|[f_{k_n}^n] - [f_{k_i}^i]\| + \|[f_{k_i}^i] - f\| < \\ &< 2^{-n} + 2^{-n} + \varepsilon_n + 2^{-i} + \varepsilon_i \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (28)$$

A fenti teljessé tevési módszer minden nem teljes metrikus térre is érvényes.

## IRODALOM

- [1] Pócsik György, Magyar Fizikai Folyóirat, 1965.
- [2] A. S. Wightman, Phys. Rev. 101, 860, 1956.
- [3] H. J. Borchers, Nuovo Cimento, 24, 214, 1962.
- [4] K. Hepp—R. Jost—D. Ruelle—O. Steinmann, Helv. Phys. Acta, 34, 542, 1961.
- [5] E. C. G. Sudarshan—K. Bardacki, Journal of Math. Phys, 2, 767, 1961.
- [6] R. F. Streater—A. S. Wightman, PTC, Spin and Statistics and All That, W. A. Benjamin, Inc., 1964.
- [7] A. S. Wightman, „Recent Achievements of Axiomatic Field Theory” in Theoretical Physics, IAEA, Vienna, 1963.
- [8] L. Gårding—J. L. Lions, Nuovo Cimento Supplemeto 14, 9, 1959.
- [9] D. Kastler, Introduction à l'électrodynamique quantique, Dunod, Paris, 1961.





# *A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL*

## KINEMATIKAI ÉS MECHANIKAI ÖSSZEFÜGGÉSEK ÚJ KVANTUMELMÉLETI ÉRTELMEZÉSÉRŐL\*

W. HEISENBERG

A dolgozatban kísérletet teszünk rá, hogy megvessük egy kvantumelméleti mechanika alapjait, mely csakis elvileg megfigyelhető mennyiségek között fennálló összefüggésekre épül fel.

Ismeretes, hogy a formális szabályokkal szemben, melyeket általában a kvantumelméletben megfigyelhető mennyiségek (pl. a hidrogén atom energiája) kiszámítására használnak, az a súlyos kifogás emelhető, hogy e számítási szabályok lényeges alkotóelemként olyan mennyiségek között fennálló összefüggéseket tartalmaznak, amelyek — úgy látszik — elvileg megfigyelhetetlenek (mint pl. az elektron helye, keringési ideje), hogy tehát ezeknek a szabályoknak nincs semmilyen szemléletes fizikai alapjuk, hacsak nem akarunk még mindig ragaszkodni a reményhez, hogy a mondott, mindeddig megfigyelhetetlen mennyiségeket később talán kísérletileg hozzáférhetővé lehet majd tenni. Ezt a reményt jogosnak tekinthetnénk, ha az említett szabályok önmagukban következetesen és a kvantumelméleti problémák világosan körülhatárolt területére volnának alkalmazhatók. A tapasztalat azonban azt mutatja, hogy a kvantumelméletnek ezekkel a formális szabályaival csak a hidrogén atom és annak Stark-effektusa állnak összhangban, de már a „keresztezett terek” (hidrogén atom különböző irányú elektromos és mágneses terekben) problémája esetében alapvető nehézségek lépnek fel, hogy az atomok visszahatása periodikusan változó terekre bizonyosan nem írható le az említett szabályokkal, és végül, hogy a kvantumszabályok kiterjesztése a többelektromos atomok tárgyalására lehetetlennek bizonyult. A kvantumelméleti szabályoknak — minthogy a klasszikus mechanika alkalmazása valóban lényeges jellemzőjük — ezt a kudarcát szokásossá vált a klasszikus mechanikától mutakozó eltérésként értelmezni. Ezt az értelmezést azonban aligha tekinthetjük megfelelőnek, ha megfontoljuk, hogy már az (egészen általános érvényű) Einstein—Bohr-féle frekvenciafeltétel oly teljes mértékű szakítást jelent a klasszikus mechanikával, vagy helyesebben — a hullámelmélet szemszögéből tekintve — az ezen mechanika alapjául szolgáló kinematikával, hogy a klasszikus mechanika érvényességére éppenséggel már a legegyszerűbb kvantumelméleti probléma esetében sem gondolhatunk. A dolgok ilyen állása mellett tanácsosabbnak látszik reményünket az eddig meg nem figyelt mennyiségek (így az elektron helye, keringési ideje) megfigyelésére teljesen feladni, egyszersmind tehát elismerni, hogy az említett kvantumszabályok részleges egyezése a tapasztalattal többé-kevésbé a véletlen műve, és kísérletet tenni egy a klasszikus mechanikával analóg kvantumelméleti mechanika kiépítésére, melyben csak megfigyelhető meny-

\* Zeitschrift für Physik 33, 879, 1925.



nyiségek között fennálló összefüggések fordulnak elő. Egy ilyen kvantumelméleti mechanika megalkotása felé tett első, legfontosabb lépéseknek a frekvenciafeltétel mellett a Kramers-féle diszperzió-elmélet<sup>1</sup> és az erre az elméletre építő, ezt továbbfejlesztő munkák<sup>2</sup> tekinthetők. A következőkben néhány új kvantumelméleti összefüggést szándékozunk fejtegetéseink középpontjába állítani és egyes speciális problémák teljes tárgyalására felhasználni. Eközben egy szabadsági fokkal rendelkező rendszerekre szorítkozunk.

1. A klasszikus elméletben valamely mozgó elektron sugárzását (a hullámzónában, vagyis az  $\mathfrak{E} \sim \mathfrak{H} \sim \frac{1}{r}$  tartományban) nem egyedül az

$$\mathfrak{E} = \frac{e}{r^3 c^2} \mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}}),$$

$$\mathfrak{H} = \frac{e}{r^2 c^2} \dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{r}$$

kifejezések adják meg; a következő közelítésben ezekhez további tagok járulnak. Ilyen pl. az

$$\frac{e}{rc^3} \dot{\mathbf{v}} \mathbf{v}$$

alakú tag, melyet „kvadrupólsugárzás”-nak nevezhetünk. Még magasabb közelítésben nyerjük pl. az

$$\frac{e}{rc^4} \dot{\mathbf{v}} \mathbf{v}^2$$

alakú tagot. Ily módon a közelítésben akármeddig elmehetünk. (Az előzőkben használt szimbólumok jelentése:  $\mathfrak{E}$  és  $\mathfrak{H}$  a térerősségek a kiszemelt pontban,  $e$  az elektron töltése,  $r$  az elektron távolsága a kiszemelt ponttól,  $\mathbf{v}$  az elektron sebessége.)

Feltehetjük a kérdést, miképpen kell festeniök ezeknek a magasabb rendű tagoknak a kvantumelméletben. A klasszikus elméletben a magasabb közelítések egyszerűen kiszámíthatók, ha az elektron mozgása, ill. annak Fourier-előállításra adott, így tehát valami hasonlót várunk a kvantumelméletben is. Ennek a kérdésnek az elektrodinamikához nincs semmi köze; az — és ez a körülmény különösen fontosnak látszik számunkra — tisztán *kinematikai* természetű. A kérdés a legegyszerűbb alakban így fogalmazható meg: Legyen adott az  $x(t)$  klasszikus mennyiség helyére lépő kvantummechanikai mennyiség; mely kvantummechanikai mennyiség foglalja el ekkor  $x(t)^2$  helyét?

Mielőtt ezt a kérdést megválaszolhatnánk, vissza kell rá emlékeznünk, hogy a kvantumelméletben nem lehetett az elektronhoz a tér egy pontját mint az idő függvényét megfigyelhető mennyiségek segítségével hozzárendelni. Kisugárzást azonban a kvantumelméletben is rendelhetünk az elektronhoz; ezt a sugárzást először is a frekvenciák segítségével írjuk le, melyek mint két változó függvényei lépnek fel, a kvantumelméletben a

$$v(n, n-\alpha) = \frac{1}{h} \{W(n) - W(n-\alpha)\},$$



a klasszikus elméletben a

$$v(n, \alpha) = \alpha \cdot v(n) = \alpha \frac{1}{h} \frac{dW}{dn}$$

alakban. (Itt  $n \cdot h = J$ , ahol  $J$  a kanonikus állandók egyike.)

A klasszikus és a kvantumelmélet összehasonlítása céljából mint jellemző összefüggéseket felírhatjuk a frekvenciákra vonatkozó kombinációs relációkat:

$$\text{a klasszikus elméletben } v(n, \alpha) + v(n, \beta) = v(n, \alpha + \beta),$$

$$\text{a kvantumelméletben } v(n, n - \alpha) + v(n - \alpha, n - \alpha - \beta) = v(n, n - \alpha - \beta),$$

$$\text{ill. } v(n - \beta, n - \alpha - \beta) + v(n, n - \beta) = v(n, n - \alpha - \beta).$$

Másodszor a frekvenciák mellett a sugárzás leírásához szükség van amplitúdókra; az amplitúdók felfoghatók mint komplex vektorok (mindegyikük hat-hat adatot egyesít magában), melyek meghatározzák a polarizációt és a fázist. Ezek is az  $n, \alpha$  változók függvényei, úgyhogy a sugárzás szóban forgó részét a következő kifejezés állítja elő:

$$\text{a kvantumelméletben } \operatorname{Re} \{ \mathfrak{A}(n, n - \alpha) e^{i\omega(n, n - \alpha)t} \}, \quad (1)$$

$$\text{a klasszikus elméletben } \operatorname{Re} \{ \mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t} \}. \quad (2)$$

Első pillantásra úgy látszik, hogy a fázisnak (mely  $\mathfrak{A}$ -ban foglaltatik) a kvantumelméletben nincs fizikai jelentése, hiszen a kvantumelméletben a frekvenciák a megfelelő felrezgésekkel általában nem összemérhetők. Nyomban látni fogjuk azonban, hogy a fázisnak a kvantumelméletben is határozott, a klasszikus elméletben betöltöthöz hasonló jelentése van. Vegyünk szemügyre most valamely meghatározott  $x(t)$  mennyiséget a klasszikus elméletben; ekkor az

$$\mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t}$$

mennyiségek összessége felfogható  $x(t)$  reprezentánsaként. Aszerint, hogy a mozgás periodikus-e vagy sem, az  $\mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t}$  mennyiségek összeggé vagy integrállá egyesítve előállítják  $x(t)$ -t:

$$\left. \begin{aligned} \text{ill.} \quad x(n, t) &= \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t}, \\ x(n, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t} d\alpha. \end{aligned} \right\} \quad (2a)$$

A megfelelő kvantumelméleti mennyiségeket, úgy látszik, az  $n, n - \alpha$  mennyiségek egyenjogúsága folytán nem lehet ily módon önkénymentesen egyesíteni, az ilyen egyesítésnek ennél fogva nincs értelme. Azt azonban megtehetjük, hogy az

$$\mathfrak{A}(n, n - \alpha) e^{i\omega(n, n - \alpha)t}$$

mennyiségek összességét az  $x(t)$  mennyiség reprezentánsának tekintjük és választ keressünk a fent feltett kérdésre: Mi reprezentálja az  $x(t)^2$  mennyiséget?

A válasz a klasszikus elméletben nyilvánvalóan így hangzik:

$$\mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta - \alpha} e^{i\omega(n)(\alpha + \beta - \alpha)t}, \quad (3)$$



ill. 
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} d\alpha. \quad (4)$$

Ennek alapján írhatjuk:

$$x(t)^2 = \sum_{-\infty}^{+\infty} \beta \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t}, \quad (5)$$

ill. 
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t} d\beta. \quad (6)$$

A kvantumelméletben a legegyszerűbb és legtermészetesebb feltevésnek az látszik, ha a (3), (4) összefüggéseket a következőkkel helyettesítjük:

$$\mathfrak{B}(n, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \mathfrak{A}(n, n-\alpha) \mathfrak{A}(n-\alpha, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t}, \quad (7)$$

ill. 
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \mathfrak{A}(n, n-\alpha) \mathfrak{A}(n-\alpha, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t}; \quad (8)$$

ez az összetevési szabály csaknem szükségszerűen adódik a frekvenciákra érvényes kombinációs relációból. Ha az itt megadott (7), (8) feltevést elfogadjuk, azonnal felismerjük, hogy a kvantumelméletben az  $\mathfrak{A}$ -k fázisainak ugyanolyan nagy a fizikai jelentőségük, mint a klasszikus elméletben: csak az idő kezdőpontja és így egy az összes  $\mathfrak{A}$ -ban közös fázisállandó önkényes és van híjával fizikai jelentésnek; az egyes  $\mathfrak{A}$ -k fázisai azonban lényeges módon szerepelnek a  $\mathfrak{B}$  mennyiség kifejezésében.<sup>3</sup> Az ilyen kvantumelméleti fázisviszonyoknak a klasszikus elméletben adhatóhoz hasonló geometriai értelmezése jelenleg aligha látszik lehetségesnek.

Ha ezek után az  $x(t)^3$  mennyiség reprezentánsát kívánjuk ismerni, nehézség nélkül kapjuk:

a klasszikus elméletben  $\mathfrak{C}_\beta(n, \gamma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha, \beta \mathfrak{A}_\alpha(n) \mathfrak{A}_\beta(n) \mathfrak{A}_{\gamma-\alpha-\beta}(n), \quad (9)$

a kvantumelméletben  $\mathfrak{C}(n, n-\gamma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha, \beta \mathfrak{A}(n, n-\alpha) \mathfrak{A}(n-\alpha, n-\alpha-\beta) \mathfrak{A}(n-\alpha-\beta, n-\gamma); \quad (10)$

aperiodikus esetben a megfelelő integrálok adódnak.

Hasonlóképpen állítható elő a kvantumelméletben minden  $x(t)^n$  alakú mennyiség, és bármely adott  $f[x(t)]$  függvényhez, ha az  $x$  szerint hatványsorba fejthető, nyilvánvalóan mindenkor találhatunk kvantumelméleti analogont. Lényeges nehézséggel találjuk azonban szemben magunkat, ha az  $x(t)$ ,  $y(t)$  mennyiségeket vesszük szemügyre és az  $x(t) \cdot y(t)$  szorzatot kívánjuk képezni.

Jellemezze  $x(t)$ -t  $\mathfrak{A}$ ,  $y(t)$ -t pedig  $\mathfrak{B}$ . Ekkor  $x(t) \cdot y(t)$  reprezentánsára kapjuk:

a klasszikus elméletben  $\mathfrak{C}_\beta(n) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \mathfrak{A}_\alpha(n) \mathfrak{B}_{\beta-\alpha}(n),$

a kvantumelméletben  $\mathfrak{C}(n, n-\beta) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \mathfrak{A}(n, n-\alpha) \mathfrak{B}(n-\alpha, n-\beta).$

Míg klasszikusan  $x(t) \cdot y(t)$  mindenkor egyenlő  $y(t) \cdot x(t)$ -vel, a kvantumelméletben ez az egyenlőség általában nem teljesül. Speciális esetekben, pl. ha  $x(t) \cdot x(t)^2$ -et képezzük, ilyen nehézség nem merül fel.



Amikor — mint az ezen szakasz kezdetén feltett kérdésben —

$$v(t)\dot{v}(t)$$

alakú kifejezésekkel van dolgunk,  $v\dot{v}$ -ot a kvantumelméletben  $\frac{v\dot{v} + \dot{v}v}{2}$ -vel kell helyettesítenünk, ha azt akarjuk, hogy a szóban forgó kifejezés  $\frac{v^2}{2}$  differenciálhányadosa legyen. Hasonlóképpen bizonyára más esetekben is megadhatók természetes módon értelmezett kvantumelméleti középértékek, melyek mindenesetre még inkább hipotetikusak, mint a (7) és (8) képletek.

Az imént vázolt nehézségtől eltekintve a (7), (8) típusú képletek általánosságban elégségeseknek bizonyulhatnak arra, hogy valamely atom elektronjainak kölcsönhatását is kifejezzük az elektronok karakterisztikus amplitúdóival.

2. E megfontolások után, melyek tárgya a kvantumelmélet kinematikája volt, áttérünk a mechanikai problémára, mely  $\mathfrak{A}$ ,  $v$  és  $W$  meghatározását célozza, a rendszerben ható erőkből. Az eddigi elméletben a probléma megoldása két lépésben történt:

1. Az

$$\ddot{x} + f(x) = 0 \quad (11)$$

mozgásegyenlet integrálása.

2. A  $J$  állandó meghatározása periodikus mozgások esetén az

$$\oint p dq = \oint m \dot{x} dx = J = nh \quad (12)$$

feltételből.

Ha azt a célt tűzzük magunk elé, hogy olyan kvantumelméleti mechanikát építsünk ki, mely klasszikus mechanikával a lehető legnagyobb fokú hasonlóságot mutatja, úgy nyilvánvalóan igen kézenfekvő a (11) mozgásegyenletet közvetlenül átvenni a kvantumelméletbe, csak az  $\ddot{x}$ ,  $f(x)$  mennyiségeket szükséges eközben — nehogy az elvileg megfigyelhető mennyiségek képezte szilárd alapról letérjünk — az 1. szakaszból ismert kvantumelméleti reprezentánsaikkal helyettesítenünk. A klasszikus elméletben a (11) egyenlet  $x(n, t)$  megoldását kereshetjük határozatlan együtthatókkal (és frekvenciákkal) felírt Fourier-sor, ill. Fourier-integrál alakjában; így mindenesetre általában végtelen sok egyenletet kapunk végtelen sok ismeretlennel, illetőleg integrálegyenleteket, melyek csupán egyes speciális esetekben hozhatók az  $\mathfrak{A}$ -kra vonatkozó egyszerű rekurziós képlet alakjára. A kvantumelméletben azonban egyelőre (11) ilyen fajta megoldására vagyunk ráutalva, miután — mint azt fent megbeszéltük — az  $x(n, t)$  függvénnyel közvetlenül analóg kvantumelméleti függvényt nem lehetett definiálni.

Ennek folyománya, hogy (11) kvantumelméleti megoldása egyelőre csak a legegyszerűbb esetekben határozható meg. Mielőtt ilyen egyszerű példák tárgyalásához hozzákezdnenénk, leszámraztatjuk a  $J$  állandó meghatározására szolgáló (12) összefüggés kvantumelméleti megfelelőjét. Tegyük fel, hogy a mozgás (klasszikusan) periodikus:

$$x = \sum_{-\infty}^{+\infty} a_x(n) e^{i x \omega_n t}; \quad (13)$$



ekkor

$$m\dot{x} = m \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha a_{\alpha}(n) \cdot i\alpha\omega_n e^{i\alpha\omega_n t}$$

és

$$\oint m\dot{x} dx = \oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha a_{\alpha}(n) a_{-\alpha}(n) \alpha^2 \omega_n.$$

Minthogy továbbá  $a_{-\alpha}(n) = \overline{a_{\alpha}(n)}$  (azaz  $x$  valós), írható:

$$\oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha |a_{\alpha}(n)|^2 \alpha^2 \omega_n. \quad (14)$$

Ezt a fázisintegrált eddig többnyire  $h$  valamely egész számú többszörösével tették egyenlővé; egy ilyen feltétel azonban nemcsak, hogy igen erőltetetten illik bele a mechanikai számításba, de még az eddigi nézőpontból tekintve, a korrespondencia-elv szellemében is önkényesnek látszik, hiszen a korrespondencia-elv értelmében a  $J$ -k csupán egy additív állandótól eltekintve tartoznak  $h$  valamely egész számú többszörösével egyenlők lenni; (14) helyére természetesen

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn} \cdot \oint m\dot{x}^2 dt,$$

vagyis a

$$h = 2\pi m \cdot \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{d}{dn} (\alpha\omega_n \cdot |a_{\alpha}|^2) \quad (15)$$

összefüggésnek kellene lépnie.

Minden esetre egy ilyen összefüggés azután az  $a_{\alpha}$ -kat is csak egy állandó erejéig határozza meg, s ez a határozatlanság tapasztalatilag a feles kvantumszámok felléptével kapcsolatban nehézségekre vezetett.

Felmerül a kérdés, nyerhetünk-e egy (14)-nek és (15)-nek megfelelő kvantumelméleti összefüggést, mely megfigyelhető mennyiségekre vonatkozik. A keresett összefüggés a kifogásolt határozatlanságot automatikusan megszünteti; segítségével az  $a_{\alpha}$ -k egyértelműen meghatározhatók.

Jóllehet csak a (15) egyenlet az, amelynek létezik egyszerű — a Kramers-féle diszperzió-elmélethez kapcsolódó — kvantumelméleti alakja:<sup>4</sup>

$$h = 4\pi m \sum_0^{\infty} \alpha \{ |a(n, n+\alpha)|^2 \omega(n, n+\alpha) - |a(n, n-\alpha)|^2 \omega(n, n-\alpha) \}, \quad (16)$$

ez az összefüggés itt mégis elég az  $a$ -k egyértelmű meghatározására; az  $a$ -kban eddig határozatlan állandót ugyanis önmagától rögzíti az a kikötés, hogy létezzék egy normálállapot, amelyből már nincs sugárzás; ha a normálállapotot  $n_0$  jelzi, úgy legyen

$$a(n_0, n_0 - \alpha) = 0$$

tetszőleges  $\alpha > 0$  mellett. Ennek folytán várható, hogy a feles vagy egész számú kvantálás kérdése egy kvantumelméleti mechanikában, mely csak megfigyelhető mennyiségekre vonatkozó összefüggéseket használ, nem léphet fel.



A (11) és (16) egyenletek együtt, ha megoldhatók, nemcsak a frekvenciákat és az energiákat határozzák meg teljesen, hanem a kvantumelméleti átmeneti valószínűségeket is. Mindazonáltal a megoldás tényleges matematikai meghatározása eddig csak a legegyszerűbb esetekben sikerült. Sok rendszer — így pl. a hidrogén atom — esetében egy különleges bonyodalom jelentkezik annak folytán, hogy a megoldások részben periodikus, részben aperiodikus mozgásnak felelnek meg. Ennek folyományaképpen a (7), (8) kvantumelméleti sorok és a (16) egyenlet ilyenkor egy összegre és egy integrálra bomlanak. A kvantumelméletben a felbontás „periodikus és aperiodikus mozgásokra” általában nem vihető keresztül.

A (11) és (16) egyenleteket talán ennek ellenére legalább is elvileg a mechanikai probléma kielégítő megoldásának tekinthetnénk, ha meg lehetne mutatni, hogy ez a megoldás összhangban van, ill. nem áll ellentmondásban az eddig ismert kvantummechanikai összefüggésekkel; hogy tehát valamely mechanikai probléma kicsiny megzavarása olyan járulékos tagokat szolgáltat az energiához, ill. a frekvenciához, amelyek éppen a *Kramers* és *Born* által talált kifejezéseknek felelnek meg, nem pedig a klasszikus elméletből adódó kifejezéseknek. Meg kellene vizsgálni továbbá, vajon általában a (11) egyenletnek az itt javasolt kvantumelméleti felfogásban is megfelel-e egy  $m \frac{\dot{x}^2}{2} + U(x) = \text{const.}$  energiaintegrál és vajon az így nyert

energia eleget tesz-e a klasszikusan teljesülő  $v = \frac{\partial W}{\partial J}$ -vel analóg  $\Delta W = h\nu$  feltételnek.

Csak az ezekre a kérdésekre adandó általános válasz mutathatná meg az eddigi kvantummechanikai próbálkozások belső összefüggéseit és vezethetne egy következetesen csak megfigyelhető mennyiségekkel dolgozó kvantummechanikához. Eltekintve egy a *Kramers*-féle diszperziós képlet és a (11) és (16) egyenletek között fennálló általános összefüggéstől, a fent feltett kérdéseket csak igen speciális, egyszerű rekurzió útján megoldható esetekben válaszolhatjuk meg.

A mondott általános összefüggés a *Kramers*-féle diszperzió-elmélet és a mi (11), (16) egyenleteink között abban áll, hogy a (11) egyenlet kvantumelméleti megfelelőjéből — éppúgy, mint a klasszikus elméletben — következik, hogy a rezgő elektron a rendszer sajátrezgéseinél lényegesen rövidebb hullámhosszúságú fénnnyel szemben szabad elektronként viselkedik. Ez az eredmény a *Kramers*-féle elméletből is következik, ha még a (16) egyenletet tekintetbe vesszük. Valóban, az  $E \cos 2\pi\nu t$  hullám által indukált momentumra *Kramers* az

$$M = e^2 E \cos 2\pi\nu t \cdot \frac{2}{h} \sum_0^\infty \alpha \left\{ \frac{|a(n, n+\alpha)|^2 v(n, n+\alpha)}{v^2(n, n+\alpha) - v^2} - \frac{|a(n, n-\alpha)|^2 v(n, n-\alpha)}{v^2(n, n-\alpha) - v^2} \right\}$$

képletet kapja; a  $v \gg v(n, n+\alpha)$  esetben írható:

$$M = -\frac{2Ee^2 \cos 2\pi\nu t}{v^2 \cdot h} \sum_0^\infty \alpha \{ |a(n, n+\alpha)|^2 v(n, n+\alpha) - |a(n, n-\alpha)|^2 v(n, n-\alpha) \},$$



vagy (16)-ot tekintetbe véve:

$$M = -\frac{e^2 E \cos 2\pi \nu t}{v^2 \cdot 4\pi^2 m}.$$

3. Legegyszerűbb példaként foglalkozunk a következőkben az anharmonikus oszcillátorral:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^2 = 0.$$

A klasszikus elméletben ez az egyenlet kielégíthető az

$$x = \lambda a_0 + a_1 \cos \omega t + \lambda a_2 \cos 2\omega t + \lambda^2 a_3 \cos 3\omega t + \dots + \lambda^{\tau-1} a_\tau \cos \tau \omega t$$

alakban felvett kifejezéssel, ahol az  $a$ -k  $\lambda$  hatványsor alakjában előállított függvényei; ezen hatványsorok a  $\lambda$ -t nem tartalmazó taggal kezdődnek. A kvantumelméletben hasonló feltevessel próbálkozunk; reprezentálj  $x$ -et

$$\begin{aligned} \lambda a(n, n); \quad a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t; \quad \lambda a(n, n-2) \cos \omega(n, n-2)t; \\ \dots \quad \lambda^{\tau-1} a(n, n-\tau) \cos \omega(n, n-\tau)t \dots \end{aligned}$$

Az  $a$ -k és az  $\omega$ -k meghatározására szolgáló képletek (a  $\lambda$  nagyságrendű tagokig bezárólag) a (3), (4), ill. a (7), (8) egyenletek értelmében a következőképpen festenek:

klasszikusan

$$\left. \begin{aligned} \omega_0^2 a_0(n) + \frac{a_1^2(n)}{2} &= 0; \\ -\omega^2 + \omega_0^2 &= 0; \\ (-4\omega^2 + \omega_0^2) a_2(n) + \frac{a_1^2}{2} &= 0; \\ (-9\omega^2 + \omega_0^2) a_3(n) + a_1 a_2 &= 0; \\ \dots \dots \dots \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

a kvantumelméletben

$$\begin{aligned} \omega_0^2 a_0(n) + \frac{a^2(n+1, n) + a^2(n, n-1)}{4} &= 0; \\ -\omega^2(n, n-1) + \omega_0^2 &= 0; \\ (-\omega^2(n, n-2) + \omega_0^2) a(n, n-2) + \frac{a(n, n-1) a(n-1, n-2)}{2} &= 0; \\ (-\omega^2(n, n-3) + \omega_0^2) a(n, n-3) + \frac{a(n, n-1) a(n-1, n-3)}{2} + \\ &+ \frac{a(n, n-2) a(n-2, n-3)}{2} = 0; \\ \dots \dots \dots \end{aligned} \quad (19)$$



Ezekhez járul a kvantumfeltétel.

Klasszikusan ( $J = nh$ ):

$$1 = 2\pi m \frac{d}{dJ} \sum_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 \frac{|a_\tau|^2 \omega}{4}.$$

A kvantumelméletben:

$$h = \pi m \sum_0^\infty [|a(n+\tau, n)|^2 \omega(n+\tau, n) - |a(n, n-\tau)|^2 \omega(n, n-\tau)].$$

Innen első közelítésben — mind klasszikusan, mind kvantumelméletileg — adódik:

$$a_1^2(n), \text{ ill. } a^2(n, n-1) = \frac{(n + \text{const})h}{\pi m \omega_0}. \quad (20)$$

A kvantumelméletben a (20) alatt fellépett állandó abból a feltételből határozható meg, hogy  $a(n_0, n_0-1)$  a normálállapotban zérus legyen. Ha az  $n$  számokat úgy választjuk, hogy a normálállapothoz  $n$  zérus értéke tartozzék, azaz  $n_0=0$  legyen, úgy következik:

$$a^2(n, n-1) = \frac{nh}{\pi m \omega_0}.$$

A (18) rekurziós egyenletekből ekkor következik, hogy a klasszikus elméletben  $a_\tau$  ( $\lambda$ -ban első közelítésig menve) a  $\kappa(\tau)n^{\frac{\tau}{2}}$  alakú, ahol a  $\kappa(\tau)$  tényező független  $n$ -től. A kvantumelméletben (19)-ből kapjuk:

$$a(n, n-\tau) = \kappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}, \quad (21)$$

ahol a  $\kappa(\tau)$   $n$ -től független arányossági tényező megegyezik az előbb felléptett  $\kappa(\tau)$  tényezővel. Természetesen  $n$  nagy értékeire  $a_\tau$  kvantumelméleti értéke aszimptotikusan a klasszikus értékbe megy át.

Az energia számára kézenfekvő az

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{3} x^3 = W$$

klasszikus kifejezést választani próbaképpen; ez az itt végigszámlolt közelítésben valóban állandó kvantumelméletileg is és értéke (19), (20) és (21) szerint klasszikusan:

$$W = \frac{nh\omega_0}{2\pi}, \quad (22)$$

kvantumelméletileg



[figyelembe véve a (7), (8) képleteket]:

$$W = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) h \omega_0}{2\pi} \quad (23)$$

(a  $\lambda^2$  nagyságrendű tagokig).

Az itt elfogadott felfogás szerint tehát már a harmonikus oszcillátor esetében sem adható meg az energia a „klasszikus mechanika” segítségével; azt (22) helyett a (23) képlet szolgáltatja.

A pontosabb számítást, mely  $W$ ,  $a$ ,  $\omega$  magasabb közelítéseit is megadja, egyszerűbb példán, az

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0$$

típusú anharmonikus oszcillátor esetében végezzük el.

Klasszikusan itt írható:

$$x = a_1 \cos \omega t + \lambda a_3 \cos 3\omega t + \lambda^2 a_5 \cos 5\omega t + \dots;$$

a kvantumelméletben hasonló feltevéssel próbálkozunk:

$$a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t; \quad \lambda a(n, n-3) \cos \omega(n, n-3)t; \dots$$

Az  $a$ -k ismét  $\lambda$  hatványsor alakjában adódó függvényei; ezen hatványsorok első tagja — hasonlóan (21)-hez — az

$$a(n, n-\tau) = \kappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}$$

alakú, amint azt a (18), (19) egyenleteknek megfelelő egyenletekből kapjuk.

Ha  $\omega$ ,  $a$  kiszámítását (18), (19) alapján a  $\lambda^2$ , ill.  $\lambda$  nagyságrendű tagokig végezzük el, kapjuk:

$$\omega(n, n-1) = \omega_0 + \lambda \cdot \frac{3nh}{8\pi\omega_0^2 m} - \lambda^2 \cdot \frac{3h^2}{256\omega_0^5 m^2 \pi^2} (17n^2 + 7) + \dots, \quad (24)$$

$$a(n, n-1) = \sqrt{\frac{nh}{\pi\omega_0 m}} \left( 1 - \lambda \frac{3nh}{16\pi\omega_0^3 m} + \dots \right), \quad (25)$$

$$a(n, n-3) = \frac{1}{32} \sqrt{\frac{h^3}{\pi^3 \omega_0^7 m^3} n(n-1)(n-2)} \left( 1 - \lambda \frac{39(n-1)h}{32\pi\omega_0^3 m} \right). \quad (26)$$

Az energiára, mely definíció szerint

$$m \frac{\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{4} x^4$$

állandó tagja (azt, hogy a periodikus tagok valóban mind eltűnnek, általában nem



tudtam igazolni; a kiszámított tagokban zérusnak adódtak), kapjuk:

$$W = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) h \omega_0}{2\pi} + \lambda \cdot \frac{3 \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) h^2}{8 \cdot 4 \pi^2 \omega_0^2 \cdot m} - \lambda^2 \cdot \frac{h^3}{512 \pi^3 \omega_0^5 m^2} \left(17n^3 + \frac{51}{2} n^2 + \frac{59}{2} n + \frac{21}{2}\right). \quad (27)$$

Ezt az energiát még a Kramers—Born-féle eljárás szerint is kiszámíthatjuk, az  $\frac{m\lambda}{4} x^4$  tagot a harmonikus oszcillátorhoz járuló perturbációként felfogva. Ekkor valóban ismét pontosan a (27) eredményre jutunk, ami számomra az alapul vett kvantummechanikai egyenletek figyelemre méltó támaszának látszik. A (27) szerint számított energia eleget tesz továbbá [vö. (24)] az

$$\frac{\omega(n, n-1)}{2\pi} = \frac{1}{h} \cdot [W(n) - W(n-1)]$$

képletnek; ez ugyancsak szükséges feltételnek tekintendő, mely biztosítja annak lehetőségét, hogy az átmeneti valószínűségeket a (11), (16) egyenleteknek megfelelően határozzuk meg.

Végezetül a rotátort mutatjuk be példaként, és rámutatunk a (7), (8) összefüggések, valamint a Zeeman-effektus<sup>5</sup> és a multiplettek<sup>6</sup> intenzitásképletei között fennálló kapcsolatra.

Reprezentálja a rotátort egy elektron, mely állandó távolságra kering egy mag körül. A „mozgásegyenletek” ekkor klasszikusan és kvantumelméletileg csak annyit mondanak, hogy az elektron a magtól állandó  $a$  távolságra egyenletes síkbeli keringést végez,  $\omega$  szögsebességgel. A (16) „kvantumfeltétel”-ből (12) szerint

$$h = \frac{d}{dn} (2\pi m a^2 \omega),$$

(16) szerint

$$h = 2\pi m \{a^2 \omega(n+1, n) - a^2 \omega(n, n-1)\}$$

adódik; ezekből mindkét esetben kapjuk:

$$\omega(n, n-1) = \frac{h \cdot (n + \text{const})}{2\pi m a^2}.$$

A feltétel, mely szerint a normálállapotban a sugárzásnak el kell tűnnie, az

$$\omega(n, n-1) = \frac{h \cdot n}{2\pi m a^2} \quad (28)$$

képletre vezet.

Az energiára kapjuk:

$$W = \frac{m}{2} v^2,$$



vagy a (7), (8) egyenleteket tekintetbe véve:

$$W = \frac{m}{2} a^2 \cdot \frac{\omega^2(n, n-1) + \omega^2(n+1, n)}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2} \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \quad (29)$$

ami ismét eleget tesz az  $\omega(n, n-1) = \frac{2\pi}{h} [W(n) - W(n-1)]$  feltételnek. Az eddig szokásos elmélettől eltérő (28) és (29) képletek támaszának tekinthető, hogy sok sávós színek (olyanok is, amelyek esetében az elektronimpulzus létezése nem valószínű), Kratzer<sup>7</sup> szerint, úgy látszik, (28), (29) típusú képleteket követel meg (ezeket eddig — hogy az összhangot a klasszikus mechanikai elmélettel megőrizzék — feles számú kvantálással próbálták magyarázni).

Ahhoz, hogy a rotátor esetében eljussunk a Goudsmit—Kronig—Hönl-féle képletekhez, el kell hagynunk az egy szabadsági fokú problémák területét, és fel kell tennünk, hogy a rotátor a térben valamilyen irányban, a külső tér irányát megadó  $z$  tengely körül igen lassú  $v$  precessziót végez. Az ezen precesszióknak megfelelő kvantumszámot jelölje  $m$ . Ekkor a mozgást a következő mennyiségek jellemzik:

$$\begin{aligned} z: & a(n, n-1; m, m) \cos \omega(n, n-1)t; \\ x + iy: & b(n, n-1; m, m-1) e^{i[\omega(n, n-1) + \omega]t}; \\ & b(n, n-1; m-1, m) e^{i[-\omega(n, n-1) + \omega]t}. \end{aligned}$$

A mozgásegyenlet egyszerűen

$$x^2 + y^2 + z^2 = a^2,$$

ami (7) tekintetbe vételével a következő egyenletekre<sup>8</sup> vezet:

$$\frac{1}{2} \{ \frac{1}{2} a^2(n, n-1; m, m) + b^2(n, n-1; m, m-1) + b^2(n, n-1; m, m+1) + \frac{1}{2} a^2(n+1, n; m, m) + b^2(n+1, n; m-1, m) + b^2(n+1, n; m+1, m) \} = a^2; \quad (30)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} a(n, n-1; m, m) a(n-1, n-2; m, m) \\ & = b(n, n-1; m, m+1) b(n-1, n-2; m+1, m) \\ & + b(n, n-1; m, m-1) b(n-1, n-2; m-1, m). \end{aligned} \quad (31)$$

Ezekhez járul (16) szerint a

$$\begin{aligned} & 2\pi m \{ b^2(n, n-1; m, m-1) \omega(n, n-1) \\ & - b^2(n, n-1; m-1, m) \omega(n, n-1) \} = (m + \text{const}) h \end{aligned} \quad (32)$$

kvantumfeltétel.

Az ezen egyenleteknek megfelelő

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 &= a^2; \\ \frac{1}{4} a_0^2 &= b_1 b_{-1}; \\ 2\pi m (b_{+1}^2 - b_{-1}^2) \omega &= (m + \text{const}) h \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

klasszikus összefüggések elégségesek ahhoz, hogy az  $a_0$ ,  $b_1$ ,  $b_{-1}$  mennyiségeket



egyértelműen meghatározzák (eltekintve az  $m$  mellett felléptett határozatlan állandótól).

A (30), (31), (32) kvantumelméleti egyenletek legegyszerűbben kínálkozó megoldása:

$$b(n, n-1; m, m-1) = a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n+m)}{4(n+\frac{1}{2})n}};$$

$$b(n, n-1; m-1, m) = a \sqrt{\frac{(n-m)(n-m+1)}{4(n+\frac{1}{2})n}};$$

$$a(n; n-1; m, m) = a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n-m)}{(n+\frac{1}{2})n}}.$$

Ezek a kifejezések megegyeznek *Goudsmit*, *Kronig* és *Hönl* képleteivel; mindazonáltal nem lehet egyszerűen belátni, hogy ezek a kifejezések (30), (31), (32) egyetlen megoldását szolgáltatják, ami azonban számomra — tekintetbe véve a határfeltételeket (az  $a$ -k és  $b$ -k eltűnése a „határon”, vö. *Kronig*, *Sommerfeld* és *Hönl*, *Russel* fent idézett munkáival) — igen valószínűnek látszik.

Az itt elvégzetthez hasonló megfontolás a multiplettek intenzitásképletei esetében is arra az eredményre vezet, hogy a mondott intenzitásszabályok a (7) és a (16) egyenlettel összhangban állnak. Ez ismét különösen a (7) kinematikai egyenlet helyességét alátámasztó eredménynek mondható.

Azt, hogy valamely módszer, mint az itt javasolt, kvantumelméleti adatoknak megfigyelhető mennyiségek között fennálló összefüggésekből történő meghatározására elvi szempontból már kielégítőnek tekinthető-e, vagy pedig ez a módszer a kvantumelméleti mechanika — jelenleg nyilvánvalóan igen bonyolult — fizikai problematikáját még mindig túl durván közelíti meg, majd csak az itt igen felszínesen használt módszer mélyebbre hatoló matematikai vizsgálata révén ismerhetjük fel.

Fordította: Györgyi Géza

## IRODALOM ÉS JEGYZETEK

- [1] *H. V. Kramers*, *Nature* 113, 673, 1924.
- [2] *M. Born*, *ZS. f. Phys.* 26, 379, 1924. *H. A. Kramers* és *W. Heisenberg*, *ZS. f. Phys.* 31, 681, 1925. *M. Born* és *P. Jordan*, *ZS. f. Phys.* (megjelenőben).
- [3] Vö. még *H. A. Kramers* és *W. Heisenberg*, i. m. Az indukált szórás momentum ott használt kifejezéseiben a fázisok lényeges módon szerepelnek.
- [4] Ezt az összefüggést már a diszperzióra vonatkozó megfontolások alapján megadta *W. Kuhn*, *ZS. f. Phys.* 33, 408, 1925, és *Thomas*, *Naturw.* 13, 1925.
- [5] *Goudsmit* és *R. de L. Kronig*, *Naturw.* 13, 90, 1925; *H. Hönl*, *ZS. f. Phys.* 31, 340, 1925.
- [6] *R. de L. Kronig*, *ZS. f. Phys.* 31, 885, 1925; *A. Sommerfeld* és *H. Hönl*, *Sitzungber. d. Preuss. Akad. d. Wiss.* 1925, 141. old.; *H. N. Russell*, *Nature* 115, 835, 1925.
- [7] Vö. pl. *A. Kratzer*, *Sitzungber. d. Bayr. Akad.* 1922, 107. old.
- [8] A (30) egyenlet lényegében az *Ornstein—Burger-féle* összesszabályokkal.





Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Dáloki János

A kézirat beérkezett: 1965. VI. 7. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 7 (A5) ív, 6 ábra

---

Szegedi Nyomda Vállalat 65-5748

MAAILMA  
TUTKIMUSAKADEMIA  
KIRJASTO



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klaszszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klaszszikusvá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt megjelent munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.591

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Chatel Péter és Kovács István: A diszlokációk kontinuum-elmélete II. A rugalmas kontinuum alapegyenletei</i> .....	383
<i>Berecz Endre és Gellén György: Nagy elektromos vezetőképességű folyadékok és oldatok dielektromos jellemzőinek néhány mérési problémája mikrohullámú frekvencia tartományban</i> .....	399
<i>Kovács István és Balázs János: Rácshibák elektromos ellenállása fémekben</i> .....	411
<i>Pócsik György: A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei I. A térelmélet posztulátumai</i> .....	419
<i>Pócsik György: A kvantumelmélet alapelvei és legújabb eredményei II. A tér rekonstrukciója a vákuumértékek alapján</i> .....	431

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Heisenberg: Kinematikai és mechanikai összefüggések új kvantumelméleti értelmezéséről.</i> ..	447
---	-----



307.226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XIII. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1965

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# A STRIPPING REAKCIÓT KÖVETŐ GAMMA-SUGÁRZÁS CIRKULÁRIS POLARIZÁCIÓJA\*

ZIMÁNYI JÓZSEF

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## Bevezetés

A magreakciók exakt tárgyalásához a magfizikai soktest problémát kellene megoldanunk. Jelenleg azonban még igen messze vagyunk attól, hogy ezt meg tudjuk tenni. Vannak ugyan olyan exakt reakció-elméletek (pl.  $R$ -mátrix elmélet [1], Humblet—Rosenfeld-féle komplex függvénytani módszer [2]), melyek formálisan megoldást adnak a problémákra. Az így nyert kifejezésekben azonban végtelen sok paraméter szerepel, melyeknek kiszámítására ezek az elméletek semmilyen útmutatást sem adnak. E megfontolások tehát a magreakciók néhány általános tulajdonságának értelmezésére használhatók ugyan (pl. a rezonanciák létét értelmezni tudják), de konkrét folyamatok kvantitatív analízisére teljesen alkalmatlanok.

A magreakciók elméleti tárgyalásának fő nehézsége a vizsgált rendszer szabadsági fokainak rendkívül nagy száma. A tapasztalat szerint azonban vannak olyan magreakció típusok, a direkt reakciók, melyeknél a rendszernek csak egy, vagy legfeljebb néhány szabadsági foka játszik jelentős szerepet. Ha e néhány lényeges szabadsági fokon kívül az összes többi a reakció folyamán teljesen változatlanok tekintjük, matematikailag is jól kezelhető reakció modellhez jutunk. Látnunk kell azonban, hogy a számolhatóságot az exaktság rovására értük el. Mégis a tapasztalat azt mutatja, hogy az így nyert formulák a mérési eredményekkel meglepően jó összhangban vannak. Ezért fordult az utóbbi időben az érdeklődés egyre nagyobb mértékben a direkt reakciók elméleti és kísérleti vizsgálata felé.

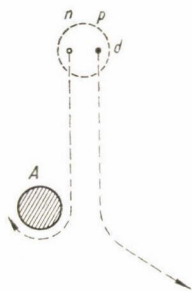
A direkt reakciók közül is talán a legtöbbet a deuteron stripping reakciókkal foglalkoztak. Ennek oka az, hogy a stripping reakciók elméletét dolgozták ki legelőször (*S. T. Butler*, 1951 [3]; *A. B. Bhatia* et al., 1952 [4]). Ez az első, Born-közelítésen alapuló elmélet igen egyszerű, de mégis segítségével a mért  $(d, p)$  és  $(d, n)$  szögeloszlásokból igen sok magspektroszkópiai adatot lehetett meghatározni. Hogy mitől működött ez az elmélet olyan jól, amikor alapfeltevései teljesen jogosulatlanok, arra a későbbiek során még visszatérünk. Itt csak annyit jegyzünk meg, hogy sikerének oka lényegében az, hogy az általa elhanyagolt kölcsönhatások, bár egyenként nagyok, de ellentétes hatásúak, s így egymás befolyását nagymértékben lerontják. (Ezt a körülményt azonban az elmélet felállításakor még nem tudták!)

Vizsgáljuk meg mostmár közelebről, hogyan is játszódik le a stripping reakció. A továbbiakban a rövidebb írás kedvéért csak a  $(d, p)$  stripping reakciókat fogjuk tárgyalni, de az eredmények — mutatis mutandi — éppen úgy érvényesek a  $(d, n)$  reakciókra is.

A  $(d, p)$  stripping reakciót a következő módon írhatjuk le szemléletesen (1. ábra). A bombázó deuteron nem centrálisan ütközik az A targetmaggal. Ennek követke-

\* Beküldve 1964. nov. 5.

tében a laza szerkezetű deutronban levő neutron a maggal erős kölcsönhatásba kerül, és abba befogódik, míg a proton eközben oly távol halad el a magtól, hogy azzal nem lép kölcsönhatásba, és útját változtatlanul folytatja. Tehát a targetmag a deutronban levő neutront mintegy ellopta a proton mellől, és a proton ezt észre sem véve folytatja útját azzal az impulzussal, mellyel éppen abban a pillanatban rendelkezett, amikor a neutront leszakította róla a targetmag. Mivel a maradék mag alap vagy alacsonyan gerjesztett állapotban keletkezik, ezért a neutron rendszerint egy meghatározott pályaimpulzusmomentum értékkel,  $\hbar l_n$ -nel fogódik be a targetmagba.



1. ábra. A  $(d, p)$  stripping reakció szemléletes képe. A  $d$  deutron az A targetmag felé halad. A kölcsönhatás révén a neutron befogódik az A targetmagba, míg a proton továbbhalad

Nézzük meg, hogy ebből az egyszerű képből mit mondhatunk a protonok szögeloszlására. A targetmagot végtelen nehézként tekintve: a távozó proton  $\mathbf{p}_p$  impulzusa összetevődik a deutron tömegközépponti mozgásából adódó  $\frac{1}{2}\mathbf{p}_d$  impulzusból és a protonnak a deutron tömegközéppontjához képest meglevő  $\mathbf{p}_{pb}$  impulzusból:

$$\mathbf{p}_p = \frac{1}{2} \mathbf{p}_d - \mathbf{p}_{pb}.$$

Annak a valószínűsége, hogy egy  $\mathbf{p}_p$  impulzusú protont detektáljunk, arányos tehát a protonnak a deutronon belül  $\mathbf{p}_{pb} = \mathbf{p}_p - \frac{1}{2}\mathbf{p}_d$  impulzusú állapotban való találásának valószínűségével. Jelöljük ennek a valószínűségnek az amplitúdóját  $G(\mathbf{p}_{pb}) = G(\mathbf{p}_p - \frac{1}{2}\mathbf{p}_d)$ -vel. Ez éppen a deutron hullámfüggvényének a Fourier transzformáltja, így tehát annak a valószínűségét kaptuk meg, hogy a proton  $\mathbf{p}_p$  impulzusú síkhullám-állapotba, a neutron pedig  $\mathbf{p}_n = \mathbf{p}_d - \mathbf{p}_p$  impulzusú síkhullám állapotba kerül. A neutron síkhullám, mint azt a gömbfüggvények szerinti sorfejtésből láthatjuk, az  $R$  sugarú mag felületén  $[j_{l_n}(k_n R)]^2$ -tel arányos valószínűséggel tartalmaz  $\hbar l_n$  pályaimpulzusmomentumú állapotot. Itt  $\mathbf{k}_n = \mathbf{p}_n/\hbar = (\mathbf{k}_d - \mathbf{k}_p)$ ,  $k_n = |\mathbf{k}_n|$ . Annak a valószínűsége tehát, hogy a neutront a mag felületén  $\hbar l_n$  pályaimpulzusmomentummal találjuk, arányos  $[j_{l_n}(k_n R)]^2$ -tel. Ahhoz, hogy a stripping reakció létrejöjjön, még szükséges, hogy a mag felületén ilyen állapotban levő neutron be is fogódjék a magba. Jelöljük a befogás valószínűségét  $\theta_{in}^2$ -tel.  $\theta_{in}^2$  éppen a maradék magban a neutronnak a mag felületén  $\hbar l_n$  pályaimpulzusmomentumú állapotban való találási valószínűsége.  $\theta_{in}^2$  csak a maradék mag szerkezetére jellemző, tehát független  $\mathbf{k}_d$ -tól és  $\mathbf{k}_p$ -tól. A fentiek alapján tehát a stripping reakció hatás-keresztmetszetét úgy írhatjuk:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \theta_{in}^2 G(K)^2 j_{l_n}(k_n R)^2,$$

ahol

$$K = |\mathbf{K}| = \left| \mathbf{k}_p - \frac{1}{2} \mathbf{k}_d \right| = \left[ k_p^2 + \frac{1}{4} k_d^2 - k_p k_d \cos \vartheta_{dp} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$k_n = |\mathbf{k}_d - \mathbf{k}_p| = [k_d^2 + k_p^2 - 2k_d k_p \cos \vartheta_{dp}]^{\frac{1}{2}}$$

$$G(K) = G(\mathbf{K}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi_d(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{K^2 + \kappa_d^2}.$$



$\kappa_d^{-1}$  a deuteron átlagos sugara,  
 $\psi_d(\mathbf{r})$  a deuteron belső mozgásának hullámfüggvénye,  
 $j_{l_n}(k_n R)$  szférikus Bessel-függvény  
 $\vartheta_{dp}$  a  $\mathbf{k}_d$  és  $\mathbf{k}_p$  közti szög.

Látható a felírt összefüggésekből, hogy mind  $K$ , mind  $k_n$  a  $\vartheta_{dp}$  szög monoton növekvő függvénye. Mivel  $j_{l_n}(k_n R)$  az argumentumának oszcilláló függvénye, ezért a  $\vartheta_{dp}$  szögnek is oszcilláló függvénye.  $G(k)$  pedig  $\vartheta_{dp}$ -nek monoton csökkenő függvénye. Így a protonok szögeloszlása a  $\vartheta_{dp}$ -nek csökkenő amplitúdóval oszcilláló függvénye. Az első maximum erősen kiemelkedik. Helyét adott magsugár és bombázó deuteron-energia esetén  $l_n$  szabja meg.  $l_n=0$  esetén  $\vartheta_{dp}=0$ -nál van az első maximum, és növekvő  $l_n$ -ek esetén egyre nagyobb szögek felé tolódik el. Így tehát a protonok szögeloszlásában az első maximum helyének meghatározásából megadhatjuk, hogy milyen  $\hbar l_n$  pályaimpulzusmomentummal fogódott be a neutron. Így a kérdéses végállapot paritását megkapjuk, és impulzusmomentumának meghatározásához is kapunk adatot.

A fenti képből még egy következtetést vonhatunk le: a proton úgy halad tovább, hogy nem időzik el közben a mag terében. A közbülső rendszer tehát, amennyiben egyáltalán beszélhetünk erről, igen rövid ideig él, tehát energiahatározatlansága igen nagy. Ebből viszont következik, hogy a reakció hatáskeresztmetszetének energiafüggése sima, nem mutathat rezonanciákat. Másrészt azt is láttuk, hogy a target-mag belső szabadsági fokainak semmilyen szerep sem jutott megfontolásunk során. Így tehát azt is beláttuk, hogy a stripping reakció valóban direkt reakció.

## Elméleti rész

### I. A stripping reakció leírása a CFDWBA\* modell alapján, a modell alapfeltevései

A kísérleti adatok kvantitatív kiértékelésére nem elégedhetünk meg a bevezetésben leírt, szemléletes kép alapján nyert formulánkkal. A következőkben a CFDWBA modell alapján pontosabb kifejezéseket fogunk levezetni a protonok szögeloszlására, polarizációjára, a protonemissziót követő  $\gamma$ -sugárzás szögeloszlására és cirkuláris polarizációjára. E modell alapfeltevései a következők:

1. Figyelembe vesszük ugyan, hogy mind a beeső deuteronhullám, mind pedig a kifutó protonhullám kölcsönhatásban van a target, illetve a végmaggal, azonban feltesszük, hogy e kölcsönhatás spintől függő tagot nem tartalmaz. Így mind a bemenő, mind a kimenő csatorna hullámfüggvényeit csak centrális (Coulomb + optikai potenciálból eredő) erők torzítják.

2. A deuteron belső mozgását leíró hullámfüggvénynek csak az  $s$  hullámú komponensét vesszük figyelembe. Ezen közelítések mellett összefüggéseket tudunk megadni a különböző mérhető korrelációk között, és képet alkothatunk arról, hogy hogyan megy végbe a stripping reakció. A spintől függő diszorciók számításba vétele elvileg nem okoz ugyan különösebb nehézséget, a kapott formulákat azonban csak nagy számolósebességű elektronikus számológépeken lehet kiértékelni, és így

\* CFDWBA = Central Force Distorted Wave Born Approximation.



azokból a numerikus számítások elvégzése nélkül összefüggéseket nem tudunk megállapítani, s a folyamat lefolyását sem tudjuk végigkövetni. A spintől függő disztorciók felléptére vannak jelek, mint azt a későbbiekben részletesebben is tárgyalni fogjuk, azonban ezek fontosságát csak további vizsgálatok fogják eldönteni. Ezért mindenképpen célszerű a matematikailag sokkal könnyebben kezelhető CFDWBA modellből kiindulnunk.

## II. A sűrűségtenzor kiszámítása

Annak érdekében, hogy az összes itt szóba jövő korrelációt egységesen tárgyalhassuk, célszerű az összes folyamatot sűrűség és érzékenységi tenzorok (Függelék I.) segítségével leírni. A vizsgálandó folyamat a következő: az  $a$  spinű,  $\alpha$  spinvetületű targetmagokat deuteronnyalábbal bombázzuk. A deuteronhullám hullámszámvektora  $\mathbf{k}_d$ ; a deuteron spinvetülete  $\mu_d$ . A targetmaggal való kölcsönhatás révén a deuteronból a neutron befogódik a magba, míg a proton továbbmegy. A protonhullámot meghatározó hullámszámvektor  $\mathbf{k}_p$ , a proton spinvetülete  $\mu_p$ . A targetmagba a neutron  $l_n, \lambda_n$  pályaimpulzusmomentummal, illetve pályaimpulzusmomentum-vetülettel, és  $j_n, m_n$  teljes impulzusmomentummal, illetve teljes impulzusmomentum-vetülettel fogódik be.  $\mathbf{j}_n = \mathbf{l}_n + \frac{1}{2}$ . A neutronbefogás révén kialakult mag spinje, illetve spinvetülete  $b, \beta$ . Ez a mag  $\gamma$  emisszióval átmegy a  $c, \gamma$  spin, illetve spinvetületű állapotba. A  $\gamma$  sugárzás által elvitt impulzusmomentum, illetve impulzusmomentum-vetület  $L, M$ . A számításokat nem polarizált targetmagokra és nem polarizált bombázó deuteronnyalábra végezzük el. Így a kezdeti állapot sűrűségoperátora:

$$\varrho^{(i)} = \frac{1}{3\hat{a}^2} \sum_{\alpha''\mu_d''} |\mathbf{k}_d \mu_d'', \alpha \alpha''\rangle \langle \mathbf{k}_d \mu_d'', \alpha \alpha''|, \quad (1)$$

ahol  $\hat{a} \equiv \sqrt{2a+1}$ . A  $|\mathbf{k}_d \mu_d'', \alpha \alpha''\rangle$  Dirac-féle ket-vektor által megadott állapot: deuteron síkhullám  $\mathbf{k}_d$  hullámszámmal,  $\mu_d$  spinvetülettel és targetmagok  $a, \alpha$  spin illetve spinvetülettel.  $|\mathbf{k}_d \mu_d, \alpha \alpha\rangle = |\mathbf{k}_d \mu_d\rangle |\alpha \alpha\rangle$ . Mivel a kezdeti állapotban polarizáció nincsen, ezért az összes spinvetület azonos súllyal szerepel. Az  $\frac{1}{3\hat{a}^2}$  együttható a normalizációs faktor. Így az itt megadott sűrűségoperátor spurja  $1: Sp \varrho^{(i)} = 1$ . A kezdeti állapotot leíró sűrűség-operátorból a végállapotot leíró sűrűségoperátort az  $R$  reakcióoperátor segítségével kapjuk meg [5], ahol  $R = S - 1$ , és  $S$  a Heisenberg-féle  $S$  operátor:

$$\varrho^{(v)} = R \varrho^{(i)} R^+. \quad (2)$$

Az előbbiekben tárgyaltak szerint a folyamat két lépésben megy végbe. Először a neutron befogódik és kialakul egy elég jól meghatározott állapot, majd ez az állapot  $\gamma$  emisszióval elbomlik. Így az  $R$  operátort faktorizálhatjuk:

$$R = R_e R_n, \quad (3)$$

ahol  $R_n$  a magkölcsönhatást,  $R_e$  pedig az elektromágneses kölcsönhatást írja le. A további számításokhoz meg kell adnunk  $\varrho^{(v)}$  operátor mátrix előállítását. Válaszszuk a

$$|\mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta\rangle = |\mathbf{k}_p \mu_p\rangle |b(Lc)\beta\rangle \quad (4a)$$



vektorokat a reprezentáció alrendszerének. Itt  $|k_p \mu_p\rangle$  szabad protonmozgást ír le,  $|b(Lc)\beta\rangle$  pedig olyan állapotot, melyben jelen van egy  $c$  spinű mag és egy  $L, \pi$  multipolaritású, illetve paritású  $\gamma$ -kvantum, s e két impulzusmomentum együttesen  $b$  impulzusmomentummá csatolódik össze  $\beta$  impulzusmomentumvetülettel. Ezek szerint

$$|b(Lc)\beta\rangle = \sum_{\gamma, M} (c\gamma, LM|b\beta)\langle c\gamma|L\pi M\rangle. \quad (4b)$$

E vektorokkal képezzük a sűrűségmátrixot. Az  $R_e$  és  $R_n$ , valamint az  $R_n$  és  $Q^{(i)}$  operátorok közé teljes függvényrendszereket írunk be, hogy konkrétan kiszámítható mátrixelemeket kapjunk. Így a következő alakot nyerjük:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | Q^{(i)} | \mathbf{k}_p \mu_p', b(L'c)\beta' \rangle &= \sum \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | R_e | \mathbf{k}_p \mu_p'', b''\beta'' B'' \rangle \times \\ &\times \langle \mathbf{k}_p \mu_p'', b''\beta'' B'' | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, a\alpha \rangle \langle \mathbf{k}_d \mu_d, a\alpha | Q^{(i)} | \mathbf{k}_d \mu_d', a\alpha' \rangle \times \\ &\times \langle \mathbf{k}_d \mu_d', a\alpha' | R_n^+ | \mathbf{k}_p \mu_p''', b'''\beta''' B''' \rangle \langle \mathbf{k}_p \mu_p''', b'''\beta''' B''' | R_e^+ | \mathbf{k}_p \mu_p', b(L'c)\beta' \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Itt a közbeiktatott teljes függvény rendszereknek csak azon tagjaira való összegezést tüntettük fel, mely tagokkal képezett mátrixelemek nem triviálisan nullák. Hogy a sűrűségmátrixnak ezt az alakját egyszerűsíthessük, vizsgáljuk közelebbről az itt fel-lépő mátrixelemeket. Mivel  $R_e$  operátor csak a  $|b(Lc)\beta\rangle$  vektorra hat, ezért rögtön írhatjuk, hogy

$$\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | R_e | \mathbf{k}_p \mu_p'', b''\beta'' B'' \rangle = \delta_{\mu_p \mu_p''} \langle b(Lc)\beta | R_e | b''\beta'' B'' \rangle. \quad (6)$$

Most vegyük figyelembe, hogy az  $R_e$  reakció-operátor a koordináta-rendszer elforgatásával szemben invariáns. Ekkor viszont az impulzusmomentum négyzete és az impulzusmomentum egyik komponense operátorával felcserélhető, így azok saját-függvényeit ugyanazon impulzusmomentum kvantumszámokkal jellemzett állapotba viszi át. Ebből következik, hogy

$$\langle b(Lc)\beta | R_e | b''\beta'' B'' \rangle = \delta_{bb''} \delta_{\beta\beta''} \langle b(Lc)\beta | R_e | b\beta B \rangle. \quad (7)$$

Írjuk ide be a  $|b(Lc)\beta\rangle$  vektor (4b) alatti kifejezését:

$$\langle b(Lc)\beta | R_e | b\beta B \rangle = \sum_{\gamma, M} (c\gamma, LM|b\beta)\langle c\gamma|LM\pi|R_e|b\beta B \rangle.$$

A  $|b\beta B\rangle$  vektor azt az állapotot írja le, melyben az atommag a  $b, \beta$  impulzusmomentum, és  $B$  egyéb kvantumszámokkal jellemzett állapotban van, és az elektromágneses térben nincsen jelen  $L, M, \pi$  impulzusmomentum és paritás kvantumszámokkal jellemzett foton. Írhatjuk tehát, hogy

$$|b\beta B\rangle = |b\beta B\rangle |0 \text{ foton}\rangle.$$

Most már csak azt kell figyelembe vennünk, hogy  $R_e$ -nek az  $\langle LM\pi|$  és  $|0 \text{ foton}\rangle$  vektorokkal képezett mátrixeleme egy  $L$ -ed rendű irreducibilis tenzoroperátor,  $T_{LM\pi}$ , mely a  $B$  mag állapotvektorára hat. Ezek értelmében a mátrixelemet így írhatjuk tovább

$$\langle b(Lc)\beta | R_e | b\beta B \rangle = \sum_{\gamma, M} (c\gamma, LM|b\beta)\langle c\gamma|T_{LM\pi}|b\beta \rangle. \quad (8)$$

A Wigner—Eckart tétel [7] értelmében, az irreducibilis tenzor-operátor impulzus-

momentum sajátfüggvényekkel képezett mátrixelemét faktorizálhatjuk egy Clebsch—Gordan együttható és egy mágneses kvantumszámoktól független redukált mátrixelem szorzatára:

$$\langle c\gamma | T_{LM\pi} | b\beta \rangle = (c\gamma, LM | b\beta) \langle c || L\pi || b \rangle.$$

Ezt az összefüggést (8)-ba behelyettesítve és a Clebsch—Gordan együtthatók ortho-normalitását figyelembe véve kapjuk:

$$\langle b(Lc)\beta | R_e | b\beta B'' \rangle = \langle c || L\pi || b \rangle. \quad (9)$$

(7) és (9)-et (6)-ba helyettesítjük:

$$\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | R_e | \mathbf{k}_p \mu_p'', b''\beta'' B'' \rangle = \delta_{\mu_p \mu_p''} \delta_{b\beta''} \delta_{\beta\beta''} \langle c || L\pi || b \rangle. \quad (10)$$

Ennek az összefüggésnek a felhasználásával  $\varrho^{(v)}$  mátrixelemére (5)-ből a következő alakot kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | \varrho^{(v)} | \mathbf{k}_p \mu_p', b(L'c)\beta' \rangle &= \langle c || L\pi || b \rangle \langle c || L'\pi' || b \rangle^* \times \\ &\times \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \mu_d\mu_d'}} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha' \rangle \langle \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha' | \varrho^{(i)} | \mathbf{k}_d \mu_d', \alpha\alpha' \rangle \times \\ &\times \langle \mathbf{k}_p \mu_p', b\beta' | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d', \alpha\alpha' \rangle^*. \end{aligned} \quad (11)$$

A  $\varrho^{(i)}$  operátor (1) alatt megadott alakjából leolvashatjuk, hogy a kezdeti állapot sűrűségmátrix-elemei:

$$\langle \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha' | \varrho^{(i)} | \mathbf{k}_d \mu_d', \alpha\alpha' \rangle = \frac{1}{3\hat{a}^2} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mu_d \mu_d'}. \quad (12)$$

Helyettesítsük be (11)-be  $\langle \varrho^{(i)} \rangle$ -nek ezt az alakját:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | \varrho^{(v)} | \mathbf{k}_p \mu_p', b(L'c)\beta' \rangle &= \frac{1}{3\hat{a}^2} \langle c || L\pi || b \rangle \langle c || L'\pi' || b \rangle^* \times \\ &\times \sum_{\alpha\mu_d} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha' \rangle \langle \mathbf{k}_p \mu_p', b\beta' | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha' \rangle^*. \end{aligned} \quad (13)$$

Foglalkozzunk most a reakció-mátrixelemmel. A II. Függelék F 28. képlete szerint:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha' \rangle &= \int \left[ \varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p \vec{r}_p') \chi_{\mu_p}^+(\sigma_p) \psi_{b\beta}^+(\xi, \vec{r}_n \sigma_n) V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \psi_{\alpha\alpha'}(\xi) \times \right. \\ &\times \left. \psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \varphi_d^{(+)}\left(\mathbf{k}_d, \frac{\vec{r}_n + \vec{r}_p}{2}\right) \chi_{\mu_d}(\sigma_n, \sigma_p) \right] d\xi d\vec{r}_n d\vec{r}_p d\sigma_n d\sigma_p. \end{aligned} \quad (14)$$

Első lépésként a  $\xi$ -re való integrálást végezzük el.

$$\int \psi_{b\beta}^+(\xi, \vec{r}_n \sigma_n) \psi_{\alpha\alpha'}(\xi) d\xi = \sum_{l_n j_n m_n} (\alpha\alpha', j_n m_n | b\beta) \theta_{j_n l_n}^{ba} \Phi_{j_n l_n m_n}^+(\vec{r}_n, \sigma_n). \quad (15)$$

Ezzel az összefüggéssel definiáljuk a  $\theta_{j_n l_n}^{ba}$  redukált neutron-szélességet. Mint az a képletből leolvasható,  $\theta_{j_n l_n}^{ba}$  éppen az a valószínűségi amplitúdó, mely megadja, hogy milyen amplitúdóval fordul elő a  $\psi_{b\beta}$  hullámfüggvényben a  $\Phi_{j_n l_n m_n}$  függvénnyel



jellemzett neutron állapot. A Clebsch—Gordan együttható fellépte nyilvánvaló: a keletkezett B mag impulzusmomentuma a targetmag és a neutron impulzusmomentumaiból kell, hogy összetevődjék.  $\Phi_{j_n l_n m_n}$ -et héjmodell függvénynek vesszük fel:

$$\Phi_{j_n l_n m_n}(\vec{r}_n, \sigma_n) = \sum_{\lambda_n, \mu_n} (l_n m_n, \frac{1}{2} \mu_n | j_n m_n) \chi_{\mu_n}(\sigma_n) i^{l_n} Y_{l_n \lambda_n}(\hat{r}_n) u_{l_n}(r_n). \quad (16)$$

A deuteron spinfüggvénye:

$$\chi_{\mu_d}(\sigma_n, \sigma_p) = \sum_{v_p, v_n} (\frac{1}{2} v_p, \frac{1}{2} v_n | 1 \mu_d) \chi_{v_p}(\sigma_p) \chi_{v_n}(\sigma_n).$$

Így a spinfüggvények szorzata:

$$(\chi_{\mu_p} \chi_{\mu_n}, \chi_{\mu_d}) = (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1 \mu_d). \quad (17)$$

15, 16 és 17-et 14-be helyettesítjük:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha \rangle &= \sum_{\substack{j_n l_n \\ m_n \lambda_n \mu_n}} \theta_{j_n l_n}^{ba}(\alpha, j_n m_n | b\beta) (l_n \lambda_n, \frac{1}{2} \mu_n | j_n m_n) \times (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1 \mu_d) \times \\ &\times i^{-l_n} \int \varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \vec{r}_p') Y_{l_n \lambda_n}^*(\hat{r}_n) u_{l_n}^*(r_n) V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \varphi_d^{(+)}\left(\mathbf{k}_d, \frac{\vec{r}_n + \vec{r}_p}{2}\right) d\vec{r}_n d\vec{r}_p. \end{aligned}$$

Vezessük be a következő jelölést:

$$\begin{aligned} B_{l_n \lambda_n} &= \frac{i^{-l_n}}{\hat{l}_n} \int \varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \vec{r}_p') Y_{l_n \lambda_n}^*(\hat{r}_n) u_{l_n}^*(r_n) \times \\ &\times V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \varphi_d^{(+)}\left(\mathbf{k}_d, \frac{\vec{r}_n + \vec{r}_p}{2}\right) d\vec{r}_n d\vec{r}_p. \end{aligned} \quad (18)$$

Ezzel a jelöléssel a reakció-mátrixelem:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha \rangle &= \\ &= \sum_{\substack{j_n l_n \\ m_n \lambda_n \mu_n}} \theta_{j_n l_n}^{ba} \hat{l}_n B_{l_n \lambda_n} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1 \mu_d) (l_n \lambda_n, \frac{1}{2} \mu_n | j_n m_n) (\alpha, j_n m_n | b\beta). \end{aligned} \quad (19)$$

A reakció-mátrixnak ezt az alakját 13-ba helyettesítve a sűrűségmátrixra a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} &\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | \varrho^{(v)} | \mathbf{k}_p \mu'_p, b(L'c)\beta' \rangle = \\ &= \frac{1}{3\hat{a}^2} \langle c || L\pi || b \rangle \langle c || L'\pi' || b \rangle^* \sum_{\substack{j_n j'_n \\ l_n l'_n \\ \lambda_n \lambda'_n}} \{ \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \hat{l}_n \hat{l}'_n B_{l_n \lambda_n} B_{l'_n \lambda'_n}^* \times \\ &\times \sum_{\substack{\alpha \mu_d \\ \mu_n \mu'_n \\ m_n m'_n}} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1 \mu_d) (l_n \lambda_n, \frac{1}{2} \mu_n | j_n m_n) (\alpha, j_n m_n | b\beta) \times \\ &\times (\frac{1}{2} \mu'_p, \frac{1}{2} \mu'_n | 1 \mu_d) (l'_n \lambda'_n, \frac{1}{2} \mu'_n | j'_n m'_n) (\alpha, j'_n m'_n | b\beta') \}. \end{aligned} \quad (20)$$

Definiáljuk most a neutron-pályaimpulzusmomentum statisztikus tenzort:

$$Q_{k_l \times l}(l_n, l'_n) = \sum_{\lambda_n \lambda'_n} (-1)^{l'_n - \lambda'_n} (l_n \lambda_n, l'_n - \lambda'_n | k_l \lambda_l) B_{l_n \lambda_n} B_{l'_n \lambda'_n}^*, \quad (21)$$

és a végállapotot leíró vegyes sűrűségtenzort:

$$Q_{k_p \times p, k_b \times b}^{(v)}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = \sum_{\substack{\mu_p \mu_p' \\ \beta \beta'}} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu_p'} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} - \mu_p' | k_p \times_p) (-1)^{b - \beta'} (b\beta, b - \beta' | k_b \times_b) \times \\ \times \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc)\beta | Q^{(v)} | \mathbf{k}_p \mu_p', b(L'c)\beta' \rangle. \quad (22)$$

20 és 21-et 22-be helyettesítve, némi Racah algebrát használva, kapjuk a végállapotot leíró vegyes sűrűségtenzorra (III. Függelék, F 34) a kívánt alakot:

$$Q_{k_p \times p, k_b \times b}^{(v)}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = \langle c \| L\pi \| b \rangle \langle c \| L'\pi' \| b \rangle \times \\ \times \sum_{\substack{l_n l'_n j_n j'_n \\ k_l \lambda_l}} \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \frac{\hat{b}^2}{\hat{a}^2} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n \hat{k}_l \hat{k}_p (-1)^{j_n - b - a - k_b - \times_p} \times \\ \times Q_{k_l \times l}(l_n l'_n) W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}; 1k_p) W(j_n b j'_n b; a k_b) (k_l \lambda_l, k_p - \times_p | k_b \times_b) \begin{Bmatrix} l_n & l'_n & k_l \\ j_n & j'_n & k_b \end{Bmatrix}. \quad (23)$$

Itt mind a  $\langle c \| L\pi \| b \rangle$  redukált mátrixelemről, mind pedig  $\theta_{j_n l_n}^{ba}$ -ról elhagytuk a csillagot. Mint kimutatható ugyanis, az általunk használt  $\gamma$  átmeneti redukált mátrixelemek valósak [9]. A [9]-ben idézett gondolatmenethez hasonlóan igazolható, hogy  $\theta_{j_n l_n}^{ba}$  is valós. E gondolatmenet alapján még azt is beláthatjuk, hogy a neutron  $u_{l_n}(r)$  radiális függvénye is valós.

A redukált  $\gamma$ -átmeneti mátrixelemeknek csak relatív értékeire van szükségünk a korrelációk számításánál. Ezért célszerűen úgy választjuk normálásukat, hogy

$$\sum_{L\pi} \langle c \| L\pi \| b \rangle^2 = 1 \quad (24)$$

legyen.

### III. Az érzékenységi tenzorok

A korreláció-függvények meghatározásához az előző fejezetben kiszámított sűrűségtenzorokon kívül szükségünk van még az érzékenységi tenzorokra. A következőkben az egyes korreláció-mérések érzékenységi tenzorait fogjuk kiszámítani.

#### a) A protonok szögeloszlásának méréséhez tartozó érzékenységi tenzor

Ha csak a protonok szögeloszlását mérjük, akkor a mérőberendezés érzékenységi operátora:

$$\varepsilon = |\mathbf{k}_p \times \mathbf{k}_p|.$$



Ennek az operátornak a mátrixelemei a 4a-ban felírt vektorokkal képezve:

$$\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc) \beta | \varepsilon | \mathbf{k}_p \mu'_p, b(L'c) \beta' \rangle = \delta_{L\pi, L'\pi} \delta_{\mu_p \mu'_p} \delta_{\beta \beta'}. \quad (25)$$

Képezzük a vegyes érzékenységi tenzort ugyanazon a módon, ahogyan a vegyes sűrűségtenzort (22) képeztük:

$$\varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = \sum_{\substack{\beta \beta' \\ \mu_p \mu'_p}} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu'_p} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} - \mu'_p | k_p \times_p) \times \\ \times (-1)^{b - \beta'} (b \beta, b - \beta' | k_b \times_b) \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc) \beta | \varepsilon | \mathbf{k}_p \mu'_p, b(L'c) \beta' \rangle.$$

Ide beírva 25-öt, és az összegezést elvégezve, a következő eredményt kapjuk:

$$\varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = \frac{1}{2} \hat{b} \delta_{L\pi, L'\pi} \delta_{k_p, 0} \delta_{\times_p, 0} \delta_{k_b, 0} \delta_{\times_b, 0}. \quad (26)$$

b) A protonok polarizációjának méréséhez tartozó érzékenységi tenzor

A protonok polarizációját úgy határozzuk meg, hogy megmérjük a  $+\frac{1}{2}$  spinvetületű protonok, majd a  $-\frac{1}{2}$  spinvetületű protonok számát. E két szám különbségét osztjuk a két szám összegével. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy meghatározzuk a korreláció-függvény,  $w(\mu_p)$  értékét  $\mu_p = +\frac{1}{2}$  és  $\mu_p = -\frac{1}{2}$  esetén. Ezekből a  $P_p$  protonpolarizáció:

$$P_p = \frac{w(+\frac{1}{2}) - w(-\frac{1}{2})}{w(+\frac{1}{2}) + w(-\frac{1}{2})}. \quad (27)$$

Mivel a polarizáció koordináta-rendszer-től függő fogalom, a polarizáció-számításnál különös gondot kell majd fordítanunk a koordináta-rendszer megválasztására.

E mérésnél tehát két érzékenységi operátorunk van:

$$\varepsilon^+ = |\mathbf{k}_p, +\frac{1}{2}\rangle \langle \mathbf{k}_p, +\frac{1}{2}|,$$

$$\varepsilon^- = |\mathbf{k}_p, -\frac{1}{2}\rangle \langle \mathbf{k}_p, -\frac{1}{2}|.$$

Az előző pontban leírt módon képezve az érzékenységi mátrixot, majd az érzékenységi tenzort, a következő kifejezésekre jutunk:

$$\varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}^{(+)}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = -\hat{b} \delta_{L\pi, L'\pi} \delta_{k_b, 0} \delta_{\times_b, 0} \delta_{\times_p, 0} (\frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | k_p 0), \quad (28)$$

$$\varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}^{(-)}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = (-1)^{k_p - 1} \delta_{L\pi, L'\pi} \delta_{k_b, 0} \delta_{\times_b, 0} \delta_{\times_p, 0} (\frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | k_p 0) \hat{b}. \quad (29)$$

A korreláció függvény F 6 szerint:

$$w(\pm \frac{1}{2}) = \sum_{\substack{k_p \times_p \\ k_b \times_b \\ L\pi, L'\pi}} \varrho_{k_p \times p, k_b \times b}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') \varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}^{(\pm)*}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL').$$

E függvényeket 28 és 29 felhasználásával számítjuk ki, majd a 27 képletbe való helyettesítésükkel kapjuk a protonpolarizáció kifejezését:

$$P_p = \frac{\varrho_{10,00}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb)}{\varrho_{00,00}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb)}. \quad (30)$$

c) A  $\gamma$ -sugárzás cirkuláris polarizáció-korreláció méréséhez tartozó érzékenységi tenzor

Ebben az esetben mérjük a kilépő protonok impulzusának irányát, a velük koincidenenciában levő  $\gamma$ -kvantumok impulzusának irányát és cirkuláris polarizációját. A cirkuláris polarizációt mérő detektor  $\Omega$  szögekkel jellemzett irányban van elhelyezve. Az érzékenységi operátor tehát:

$$\varepsilon = \sum_{\sigma} |\mathbf{k}_p\rangle |\Omega\sigma\rangle p(\sigma) \langle\Omega\sigma| \langle\mathbf{k}_p| = (|\mathbf{k}_p\rangle \langle\mathbf{k}_p|) \varepsilon_f,$$

ahol

$$\varepsilon_f = \sum_{\sigma} |\Omega\sigma\rangle p(\sigma) \langle\Omega\sigma|. \quad (31)$$

Itt  $p(\sigma)$  a  $\sigma$  polarizáció-állapotú  $\gamma$ -kvantum detektálási hatásfoka. Ennek az operátornak a mátrixelemei a 4a, vektorokkal képezve:

$$\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b(Lc) \beta | \varepsilon | \mathbf{k}_p \mu'_p, b(L'c) \beta' \rangle = \delta_{\mu_p \mu'_p} \langle b(Lc) \beta | \varepsilon_f | b(L'c) \beta' \rangle. \quad (32)$$

A  $|b(Lc) \beta\rangle$  vektorok 4b-beli felbontásának felhasználásával így írhatjuk tovább az érzékenységi mátrixot:

$$\begin{aligned} \langle b(Lc) \beta | \varepsilon_f | b(L'c) \beta' \rangle &= \\ &= \sum_{\substack{\gamma\gamma' \\ MM'}} (c\gamma, LM | b\beta) (c\gamma', L' M' | b\beta') \delta_{\gamma\gamma'} \langle LM\pi | \varepsilon_f | L' M' \pi' \rangle. \end{aligned}$$

A vegyes érzékenységi tenzorunk a következő alakú:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{k_p \times_p, k_b \times_b} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL' \right) &= \left\{ \sum_{\mu_p \mu'_p} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu'_p} \left( \frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} - \mu'_p | k_p \times_p \right) \delta_{\mu_p \mu'_p} \right\} \times \\ &\times \sum_{\substack{\beta\beta'\gamma \\ MM'}} (-1)^{b-\beta'} (b\beta, b-\beta' | k_b \times_b) (c\gamma, LM | b\beta) (c\gamma', L' M' | b\beta') \langle LM\pi | \varepsilon_f | L' M' \pi' \rangle. \end{aligned} \quad (33)$$

Itt a zárójelbe tett összeg  $\frac{1}{2} \delta_{k_p, 0} \delta_{\times_p, 0}$ -val egyenlő. A  $\beta\beta'\gamma$ -ra való összegezésnél ugyanezt a módszert alkalmazzuk, mint amit a III. Függelékben az F 31 képlet után leírtunk. Ezen összegezést elvégezve érzékenységi tenzorunk a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{k_p \times_p, k_b \times_b} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL' \right) &= \delta_{k_p, 0} \delta_{\times_p, 0} (-1)^{b-c+L-k_b} \hat{\frac{1}{2}} \hat{b}^2 \times \\ &\times W(LbL'b; ck_b) \varepsilon_{k_b \times_b} (L\pi, L' \pi'), \end{aligned} \quad (34)$$

ahol

$$\varepsilon_{k_b \times_b} (L\pi, L' \pi') = \sum_{MM'} (-1)^{L'-M'} (LM, L'-M' | k_b \times_b) \langle LM\pi | \varepsilon_f | L' M' \pi' \rangle. \quad (35)$$

A továbbiakban tehát  $\varepsilon_{k_b \times_b} (L\pi, L' \pi')$ -t kell meghatároznunk. Mivel  $\varepsilon_{k_b \times_b}$  a koordináta-rendszer elforgatásakor a  $D_{\times_b \times'_b}^{k_b}(\mathcal{R})$  forgásmátrixokkal transzformálódik, célszerű először egy olyan koordináta-rendszerben kiszámítani, melyben a legegyszerűbb a számítás, s azután az itt kapott alakot az F 3-ban felírt összefüggés segítségével a kívánt koordináta-rendszerbe transzformálni. Legcélszerűbb olyan rendszerben kezdeni a számítást, melynek Z tengelye egybeesik a  $\gamma$ -kvantum hullámvektorának irányával. Az ezen speciális rendszerben felírt  $\varepsilon_{k_b \times_b} (L\pi, L' \pi')$  tenzort  $c_{k_b \times_b} (L\pi, L' \pi')$ -



vel fogjuk jelölni. A 31 és 35 képletek alapján

$$c_{k_b, \kappa_b}(L\pi, L'\pi') = \sum_{MM'} (-1)^{L'-M'} (LM, L'-M' | k_b \kappa_b) \sum_{\sigma} \langle LM\pi | 0\sigma \rangle p(\sigma) \langle 0\sigma | L'M'\pi' \rangle. \quad (36)$$

A  $\langle 0\sigma | LM\pi \rangle$  mátrixelemek a  $Z$  tengely irányában haladó,  $\sigma$  polarizációs állapotú fotonok vektorpotenciáljának a multipól terek szerinti sorfejtési együtthatói. Ezen együtthatók értéke [6]:

$$\langle 0\sigma | LM, \pi = (-1)^{L+1} \rangle = \hat{L} \sigma \delta_{\sigma, M} \quad \text{mágneses sugárzás,} \quad (37a)$$

$$\langle 0\sigma | LM, \pi = (-1)^L \rangle = \hat{L} \delta_{\sigma, M} \quad \text{elektromos sugárzás.} \quad (37b)$$

E két esetet összefoglalóan a következőképp írhatjuk:

$$\langle 0\sigma | LM\pi \rangle = [\pi(-1)^L]^{\frac{\sigma-1}{2}} \hat{L} \delta_{\sigma, M}, \quad (38)$$

mert  $\sigma$  csak a  $+1$  és  $-1$  értékeket veheti fel (a  $\sigma=0$  a longitudinális fotonnak felelne meg). A 38 kifejezést 36-ba helyettesítve, a  $\gamma$ -sugárzás  $c_{k_b, \kappa_b}(L\pi, L'\pi')$  részecske-paramétere:

$$c_{k_b, \kappa_b}(L\pi, L'\pi') = \delta_{\kappa_b, 0} \hat{L} \hat{L}' (-1)^{L'-1} (L1, L'-1 | k_b 0) \times \\ \times \{p(+1) + (-1)^{L+L'-k_b} [\pi(-1)^L] [\pi'(-1)^L] p(-1)\}.$$

Most vegyük figyelembe, hogy esetünkben egy határozott paritású állapotból egy másik határozott paritású állapotba való átmenetről van szó. Ebből következik, hogy  $\pi = \pi'$  kell, hogy legyen, és így  $\pi\pi' = +1$ . Másrészt vezessük be a  $\gamma$ -sugárzás cirkuláris polarizációját jellemző  $p_3$  számot a következő összefüggésekkel:

$$p(+1) = \frac{1}{2}(1+p_3), \quad (39)$$

$$p(-1) = \frac{1}{2}(1-p_3).$$

Ezen összefüggésekből látható, hogy  $p_3=0$  a cirkuláris polarizációra érzéketlen detektort jellemez, és  $p_3 = +1$  ill.  $-1$ , ha detektorunk csak a jobbra ill. balra cirkulárisan polározott fotonokat detektálja, de azokat 100%-os valószínűséggel. A mondottak figyelembevételével a  $\gamma$ -sugárzás  $c_{k_b, \kappa_b}(L\pi, L'\pi')$  részecske-paramétere a következő végleges alakban írható:

$$c_{k_b, \kappa_b}(L\pi, L'\pi') = \delta_{\kappa_b, 0} \hat{L} \hat{L}' (-1)^{L'-1} (L1, L'-1 | k_b 0) \times \\ \times \left\{ \frac{1+(-1)^{k_b}}{2} + p_3 \frac{1-(-1)^{k_b}}{2} \right\}. \quad (40)$$

Az F 3 képlet segítségével most már felírhatjuk tetszőleges koordináta-rendszerben az érzékenységi tenzort:

$$\varepsilon_{k_b, \kappa_b}(L\pi, L'\pi') = \sum_{\kappa_b'} c_{k_b, \kappa_b'}(L\pi, L'\pi') D_{\kappa_b, \kappa_b'}^{k_b}(\mathfrak{R}) = c_{k_b, 0}(L\pi, L'\pi') D_{\kappa_b, 0}^{k_b}(\mathfrak{R}), \quad (41)$$

ahol  $\mathfrak{R}^{-1}$  azt a forgatást jelenti, mely azt a koordináta-rendszert, melynek  $Z$  tengelyének iránya megegyezik a foton hullámvektorának irányával, átviszi az egyelőre tetszőleges koordináta-rendszerbe.  $D_{\times b, 0}^{k_b}(\mathfrak{R}) = D_{\times b, 0}^{k_b}(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{k}_b} Y_{k_b \times b}^*(\vartheta_2, \vartheta_1)$ ,

ahol  $\vartheta_1, \vartheta_2$  és  $\vartheta_3$  az  $\mathfrak{R}$  elforgatás három Euler-szöge.

Vezessük most még be az  $F_k(LL'cb)$  együtthatókat:

$$F_k(LL'cb) = (-1)^{c-b-1} \hat{b} \hat{L} \hat{L}' (L1, L' - 1 | k0) W(LbL'b; ck). \quad (42)$$

Ezek az együtthatók a [9]-ben használt  $F_k(Lcb)$  és  $G_k(LL'cb)$  együtthatókkal a következő módon függnek össze:

$$F_k(LLcb) = F_k(Lcb)$$

$$F_k(LL'cb) = (-1)^{c-b} \hat{b} \hat{L} \hat{L}' G_k(LL'cb), \quad \text{ha } L \neq L'.$$

Az  $F_k(Lcb)$  és  $G_k(LL'cb)$  együtthatók számértékei páros  $k$ -ra táblázatosan megtalálhatók [9]-ben. Páratlan  $k$  esetén a 42 definíció alapján kell kiszámítanunk őket. A 41 és 42 képletek 34-be való helyettesítésével kapjuk a teljes érzékenységi tenzort:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') &= \delta_{k_p 0} \delta_{\times p 0} (-1)^{L-L'-k_b} \tfrac{1}{2} \hat{b} \times \\ &\times F_{k_b}(LL'cb) \left\{ \frac{1 + (-1)^{k_b}}{2} + p_3 \frac{1 - (-1)^{k_b}}{2} \right\} D_{\times b, 0}^{k_b}(\mathfrak{R}). \end{aligned} \quad (43)$$

Világosan látszik ebből a kifejezésből, hogy ha a detektor érzéketlen a cirkuláris polarizációra ( $p_3 = 0$ ), akkor csak a páros  $k_b$  indexű tenzorok lesznek zérustól különbözőek. Ezek szerint a  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció függvénye:

$$W(\Omega_p, \Omega_\gamma) = w(p_3 = 0) = \sum_{\substack{L\pi, L'\pi' \\ k_b = \text{páros} \\ \times_b}} \varrho_{00, k_b \times b}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') \varepsilon_{00, k_b \times b}^*(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL'). \quad (44)$$

A  $\gamma$  cirkuláris polarizációt, a protonpolarizációhoz hasonlóan, úgy kapjuk, hogy a  $p_3 = +1$ -hez tartozó korreláció függvényből kivonjuk a  $p_3 = -1$ -hez tartozó korreláció-függvényt, s a különbséget osztjuk a két függvény összegével:

$$\begin{aligned} P_{\gamma c.p.} &= \frac{w(p_3 = +1) - w(p_3 = -1)}{w(p_3 = +1) + w(p_3 = -1)} = \\ &= \left[ \sum_{\substack{k_b = \text{páratlan} \\ \times_b}} \sum_{\substack{L\pi \\ L'\pi'}} \varrho_{00, k_b \times b}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') \varepsilon_{00, k_b \times b}^*(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') \right] \times \\ &\times \left[ \sum_{\substack{k_b = \text{páros} \\ \times_b}} \sum_{\substack{L\pi \\ L'\pi'}} \varrho_{00, k_b \times b}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') \varepsilon_{00, k_b \times b}^*(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (45)$$



## IV. A korreláció-függvények kiszámítása

A II. fejezetben kiszámítottuk a sűrűségi tenzort, a III. fejezetben pedig a különböző mérésekhez tartozó érzékenységi tenzorokat. Most tehát egyszerűen felírhatjuk a korreláció-függvényeket.

## a) A protonok szögeloszlása

A sűrűségtenzort a 26-ban felírt érzékenységi tenzonnal kell kontrahálnunk:

$$w(\vartheta_p) = \sum_{\substack{k_p, \kappa_p \\ k_b, \kappa_b \\ L\pi, L'\pi'}} Q_{k_p, \kappa_p, k_b, \kappa_b}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb, LL') \hat{b} \delta_{L\pi, L'\pi'} \delta_{k_p, 0} \delta_{\kappa_p, 0} \delta_{k_b, 0} \delta_{\kappa_b, 0} = \\ = \frac{1}{2} \hat{b} Q_{00,00}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb).$$

A  $Q_{00,00}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)$  sűrűségtenzort a III. Függelékben már kiszámítottuk. Az F 35-ben megadott alakját helyettesítve a  $w(\vartheta_p)$  szögeloszlásfüggvényünkbe, a következő kifejezést kapjuk:

$$w(\vartheta_p) = \frac{2b+1}{2(2a+1)} \sum_{l_n j_n} \theta_{j_n l_n}^{ba2} \hat{l}_n Q_{00}(l_n l_n); \quad (46)$$

vagy ugyanez a  $B_{l_n \lambda_n}$ -ekkel kifejezve:

$$w(\vartheta_p) = \frac{2b+1}{2(2a+1)} \sum_{l_n j_n} \theta_{j_n l_n}^{ba2} \sum_{\lambda_n} |B_{l_n \lambda_n}|^2. \quad (47)$$

A differenciális hatáskeresztmetszet F 29 alapján:

$$\frac{d\sigma(\vartheta_p)}{d\Omega} = \frac{M_d^* M_p^*}{4\pi\hbar^4} \frac{k_p}{k_d} w(\vartheta_p). \quad (48)$$

## b) A protonok polarizációja

A protonok  $P_p$  polarizációja 30 szerint a  $Q_{10,00}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)$  és a  $Q_{00,00}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)$  statisztikus tenzorok hányadosa. Ezeket viszont a III. Függelékben már kiszámítottuk. Így a 30. képletbe F 36-ot és F 35-öt kell helyettesítenünk:

$$P_p = \frac{2}{3^{3/2}} \frac{\sum_{l_n j_n} \theta_{j_n l_n}^{ba2} (-1)^{j_n - l_n - \frac{1}{2}} [l_n(l_n+1)(2l_n+1)]^{\frac{1}{2}} (2j_n+1)^{-1} Q_{10}(l_n l_n)}{\sum_{l_n j_n} \theta_{j_n l_n}^{ba2} \hat{l}_n Q_{00}(l_n l_n)}. \quad (49)$$

A legtöbb, a gyakorlatban előforduló esetben a neutron csak egyetlen  $l_n$  pályaimpulzuszmomentum-értékkel fogódhat be a magba. Ebben az esetben fenti képletünk jelentősen egyszerűbben írható:

$$P_p = \frac{1}{3} \left[ \frac{l_n}{l_n+1} \theta_+^2 - \theta_-^2 \right] \frac{1}{\theta_+^2 + \theta_-^2} P_{l_n}, \quad (50)$$

ahol  $\theta_{\pm} \equiv \theta_{j_n=l_n \pm \frac{1}{2}, l_n}^{ba}$  és  $P_{l_n}$  a pályaimpulzusmomentum vektorpolarizációja:

$$\begin{aligned} P_{l_n} &= \left[ \frac{l_n+1}{3l_n} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\varrho_{10}(l_n l_n)}{\varrho_{00}(l_n l_n)} = \\ &= \frac{1}{l_n} \frac{\sum_{\lambda_n} \lambda_n |B_{l_n \lambda_n}|^2}{\sum_{\lambda_n} |B_{l_n \lambda_n}|^2} = \\ &= \frac{1}{l_n \hbar} \langle L_z \rangle, \end{aligned} \quad (51)$$

ahol  $\langle L_z \rangle$  a neutron pályaimpulzusmomentum operátora  $Z$  komponensének a várható értéke.

Ha még továbbá csak egyetlen  $j_n$  érték lehetséges, akkor

$$P_p = \begin{cases} +\frac{1}{3} \frac{l_n}{l_n+1} P_{l_n}, & \text{ha } j_n = l_n + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{3} P_{l_n}, & \text{ha } j_n = l_n - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (52a)$$

$$(52b)$$

c)  $A(d, p\gamma)$  cirkuláris polarizáció-korreláció

A 45. képlet szerint először is a  $w(p_3)$  korreláció-függvényt kell megadnunk a  $P_{\gamma c.p.}$  kiszámításához. Ezért kontraháljuk a 43 képletben felírt érzékenységi tenzort a 23-ban felírt sűrűségi tenzorral:

$$\begin{aligned} w(p_3) &= \sum_{\substack{k_p \times p \\ k_b \times b \\ L\pi, L'\pi'}} \varrho_{k_p \times p, k_b \times b}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') \varepsilon_{k_p \times p, k_b \times b}^*(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') = \\ &= \sum_{\substack{k_b \times b \\ L\pi, L'\pi'}} \varrho_{00, k_b \times b}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') (-1)^{L-L'-k_b} \hat{\tfrac{1}{2}} \hat{b} F_{k_b}(LL'cb) \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{1+(-1)^{k_b}}{2} + p_3 \frac{1-(-1)^{k_b}}{2} \right\} D_{\times b, 0}^{k_b*}(\mathfrak{R}). \end{aligned}$$

Vegyük most fel koordináta-rendszerünket úgy, hogy  $Z$  tengelye a  $\gamma$ -sugarak detektálásának irányába mutasson. Ekkor  $\mathfrak{R} = 0, 0, 0$ , és  $D_{\times b, 0}^{k_b}(\mathfrak{R}) = \delta_{\times b, 0}$ . Az ezen koordináta-rendszerben felírt statisztikus tenzorokat  $\sim$  jellel fogjuk megkülönböztetni. Ebben a rendszerben korreláció-függvényünk alakja tehát a következő lesz:

$$\begin{aligned} w(p_3) &= \sum_{\substack{k_b \\ L\pi, L'\pi'}} \tilde{\varrho}_{00, k_b, 0}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb, LL') (-1)^{L-L'-k_b} \hat{\tfrac{1}{2}} \hat{b} F_{k_b}(LL'cb) \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{1+(-1)^{k_b}}{2} + p_3 \frac{1-(-1)^{k_b}}{2} \right\} = \\ &= \sum_k \tilde{\varrho}_{00, k0}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb) \hat{\tfrac{1}{2}} \hat{b} f_k(cb) (-1)^k \left\{ \frac{1+(-1)^k}{2} + p_3 \frac{1-(-1)^k}{2} \right\}, \end{aligned}$$



ahol

$$f_k(cb) = \sum_{L\pi, L'\pi'} \langle c \| L\pi \| b \rangle \langle c \| L'\pi' \| b \rangle (-1)^{L-L'} F_k(LL'cb). \quad (53)$$

A  $\tilde{Q}_{00,k0}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)$  statisztikus tenzort a III. Függelékben már megadtuk. Helyettesítjük tehát  $\tilde{Q}_{00,k0}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)$  F 37-ben adott alakját  $w(p_3)$ -ba. Így az általános korrelációs függvényünk végső alakja:

$$w(p_3) = (-1)^{b+a-\frac{1}{2}} \frac{\hat{b}^3}{2\hat{a}^2} \sum_k \sum_{\substack{l_n l'_n \\ j_n j'_n}} (-1)^{l'_n} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \\ \times W(j_n b j'_n b; ak) \tilde{Q}_{k0}(l_n l'_n) f_k(cb) (-1)^k \left\{ \frac{1+(-1)^k}{2} + p_3 \frac{1-(-1)^k}{2} \right\}. \quad (54)$$

Mivel a  $(d, p\gamma)$  iránykorrelációmérésnél csak a proton és  $\gamma$ -sugárzás irányát mérjük, de polarizációját nem, ezért  $w(p_3)$  54. alatti alakjából az iránykorreláció-függvényt,  $W(\theta_\gamma, \varphi_\gamma)$ -t, úgy kapjuk, hogy  $p_3=0$ -t helyettesítünk bele. Ekkor, mint az 54-ből világosan látszik, a  $k$ =páratlan tagok mind nullák lesznek. A szögfüggés világosabbá tételére rögzítsünk le egy koordinátarendszert, melyben  $Q_{k0}(l_n l'_n)$ -t megadjuk. Ekkor  $\tilde{Q}_{k0}(l_n l'_n)$ -t F 3 alapján így írhatjuk:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{k0}(l_n l'_n) &= \sum_{\kappa} Q_{k\kappa}(l_n l'_n) D_{0,\kappa}^k(\mathfrak{R}) = \\ &= \sum_{\kappa} Q_{k\kappa}(l_n l'_n) D_{\kappa,0}^{k*}(\mathfrak{R}^{-1}) = \\ &= \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{k}} \sum_{\kappa} Q_{k\kappa}(l_n l'_n) Y_{k\kappa}(\vartheta, \varphi), \end{aligned}$$

ahol  $\vartheta$  és  $\varphi$  a  $\gamma$ -sugár detektálása irányának polárszögei abban a koordinátarendszerben, melyben a  $Q_{k\kappa}(l_n l'_n)$ -t felírtuk. Ennek alapján az iránykorreláció-függvény:

$$W(\vartheta_\gamma, \varphi_\gamma) = \sum_{k=\text{páros}} f_k(cb) \left\{ \sum_{\substack{l_n l'_n \\ j_n j'_n}} (-1)^{b-a+\frac{1}{2}+l'_n} \frac{\hat{b}^3 \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n}{2(2a+1)\hat{k}} W(j_n b j'_n b; ak) \times \right. \\ \left. \times W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \sum_{\kappa} Q_{k\kappa}(l_n l'_n) Y_{k\kappa}(\vartheta_\gamma, \varphi_\gamma) \right\}. \quad (55)$$

A  $P_{\gamma c.p.}$  cirkuláris polarizációt 54-nek 45-be való helyettesítésével kapjuk:

$$\begin{aligned} P_{\gamma c.p.} &= \left\{ \sum' \sum_k (-1)^{l'_n+1} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \right. \\ &\quad \times W(j_n b j'_n b; ak) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \tilde{Q}_{k0}(l_n l'_n) f_k(cb) \Big\} \times \\ &\quad \times \left\{ \sum'' \sum_k (-1)^{l'_n} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \right. \\ &\quad \times W(j_n b j'_n b; ak) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \tilde{Q}_{k0}(l_n l'_n) f_k(cb) \Big\}^{-1}, \quad (56) \end{aligned}$$

ahol  $\sum'_k$  ill.  $\sum''_k$  a páratlan ill. páros  $k$  értékekre való összegezést jelenti. Az összegben előforduló  $k$  maximális értékét, a *Racah*, és az  $f_k(cb)$ -ban levő  $F_k(LL'cb)$  együtthatók szabják meg:

$$k_{\max} \leq \text{Min}(j_n + j'_n, l_n + l'_n, 2b, L + L'). \quad (57)$$

Itt érdemes felírunk még a maradék mag (B mag) vektorpolarizációját is. Az 51-ben felírt általános érvényű definíció szerint a maradék mag vektorpolarizációja:

$$P_{m.m.} = \left[ \frac{b+1}{3b} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\varrho_{00,10}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)}{\varrho_{00,00}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb)}. \quad (58)$$

Behelyettesítve ide a sűrűségtenzornak F 35-ben és F 37-ben felírt alakját, a következő eredményt kapjuk:

$$P_{m.m.} = (-1)^{b-a+\frac{1}{2}} \left[ \frac{(b+1)(2b+1)}{3b} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \sum_{\substack{l_n l'_n \\ j_n j'_n}} (-1)^{l'_n} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n b j'_n b; a1) \times \right. \\ \left. \times W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} 1) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \varrho_{10}(l_n l'_n) \right\} \left\{ \sum_{l_n j_n} \hat{l}_n \theta_{j_n l_n}^{ba2} \varrho_{00}(l_n l_n) \right\}^{-1}. \quad (59)$$

Ha a neutron, csak egyetlen  $l_n$  pályaimpulzusmomentummal fogódhat be ( $l_n = l'_n$ ), képletünk így egyszerűsödik:

$$P_{m.m.} = (-1)^{b-a+\frac{1}{2}+l_n} \left[ \frac{(b+1)(2b+1)(2l_n+1)}{b(l_n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \sum_{j_n j'_n} \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n b j'_n b; a1) W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} 1) \frac{\theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba}}{\theta_+^2 + \theta_-^2} P_{l_n}. \quad (60)$$

Térjünk most vissza a  $\gamma$ -sugarak cirkuláris polarizációjához. Az 56 és 59, vagy az általánosabb 45 és 58 képletek összehasonlításából kitűnik, hogy, ha az 57-ben felírt korlátozások miatt  $k$  csak 0 és 1 lehet, akkor:

$$P_{\gamma c.p.} = - \left[ \frac{3b}{b+1} \right]^{\frac{1}{2}} f_1(cb) P_{m.m.}, \quad \text{ha } k_{\max} = 1. \quad (61)$$

Ez az összefüggés a stripping reakció mechanizmusára tett minden feltevéstől függetlenül igaz.

Végezetül írjuk még fel a  $P_p$  protonpolarizáció és a  $P_{m.m.}$  maradék mag polarizáció közti összefüggést. Ha  $l_n = l'_n$ , akkor 50 és 60 alapján:

$$P_{m.m.} = (-1)^{b-a+\frac{1}{2}+l_n} 3 \left[ \frac{(b+1)(2b+1)(2l_n+1)}{b(l_n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \sum_{j_n j'_n} \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n b j'_n b; a1) W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} 1) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} P_p \left[ \frac{l_n}{l_n+1} \theta_+^2 - \theta_-^2 \right]^{-1}. \quad (62)$$



d) *A nyert képletek összefoglalása*

Itt az áttekinthetőség kedvéért összeírjuk az eddig nyert kifejezéseket. Először az általános alakokat írjuk fel, majd az  $l_n = l'_n$  és a  $k_{\max} = 1$ -re érvényes képleteket. Végezetül egy számpéldát írunk fel a képletek használatának illusztrálására. A képletek zárójelben írt számozása a szöveg-közi helyét jelenti.

d) I. *Általános alakok*

A protonok szögeloszlása:

$$\frac{d\sigma(\vartheta_p)}{d\Omega} = \frac{M_d^* M_p^* (2b+1) k_p}{8\pi^2 \hbar^4 (2a+1) k_d} \sum_{l_n j_n} \hat{l}_n \theta_{j_n l_n}^{ba2} \varrho_{00}(l_n l_n). \quad (63)-(48)$$

A protonpolarizáció:

$$P_p = \frac{2}{3^{3/2}} \frac{\sum_{j_n l_n} (-1)^{j_n - l_n - \frac{1}{2}} [l_n(l_n+1)(2l_n+1)]^{\frac{1}{2}} (2j_n+1)^{-1} \theta_{j_n l_n}^{ba2} \varrho_{10}(l_n l_n)}{\sum_{j_n l_n} \hat{l}_n \theta_{j_n l_n}^{ba2} \varrho_{00}(l_n l_n)}. \quad (64)-(49)$$

A  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció:

$$W(\vartheta_\gamma, \varphi_\gamma) = \sum_{k=\text{páros}} f_k(cb) \sum_{\substack{l_n l'_n \\ j_n j'_n}} (-1)^{b-a+\frac{1}{2}+l'_n} \frac{\hat{b}^3 \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n}{2(2a+1)} W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \\ \times W(j_n b j'_n b; ak) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \sum_{\kappa} \varrho_{k\kappa}(l_n l'_n) \frac{1}{\hat{k}} Y_{k\kappa}(\vartheta_\gamma, \varphi_\gamma). \quad (65)-(55)$$

A maradék mag vektorpolarizációja:

$$P_{m.m.} = (-1)^{b-a+\frac{1}{2}} \left[ \frac{(b+1)(2b+1)}{3b} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \frac{\sum_{l_n l'_n j_n j'_n} (-1)^{l'_n} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n b j'_n b; a1) W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} 1) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \varrho_{10}(l_n l'_n)}{\sum_{l_n j_n} \hat{l}_n \theta_{j_n l_n}^{ba2} \varrho_{00}(l_n l_n)}. \quad (66)-(59)$$

A  $\gamma$  sugarak cirkuláris polarizációja:

$$P_{\gamma c.p.} = \left\{ \sum_{k=\text{páratlan}} f_k(cb) \sum_{l_n l'_n j_n j'_n} (-1)^{l'_n+1} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \right. \\ \times W(j_n b j'_n b; ak) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \tilde{\varrho}_{k0}(l_n l'_n) \left. \right\} \times \\ \times \left\{ \sum_{k=\text{páros}} f_k(cb) \sum_{l_n l'_n j_n j'_n} (-1)^{l'_n} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \right. \\ \times W(j_n b j'_n b; ak) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \tilde{\varrho}_{k0}(l_n l'_n) \left. \right\}^{-1}. \quad (67)-(56)$$

d) II. Képletek az  $l_n = l'_n$  esetre

$$P_p = \frac{1}{3} \left\{ \frac{l_n}{l_n + 1} \theta_+^2 - \theta_-^2 \right\} \frac{1}{\theta_+^2 + \theta_-^2} P_{l_n}; \quad (68)$$

$$P_{m,m} = (-1)^{b-a+\frac{1}{2}+l_n} \left[ \frac{(2b+1)(b+1)(2l_n+1)l_n}{b(l_n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \sum_{j_n j'_n} \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n b j'_n b; a 1) W(j_n l_n j'_n l_n; \frac{1}{2} 1) \frac{\theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l_n}^{ba}}{\theta_+^2 + \theta_-^2} P_{l_n}. \quad (69)$$

d) III.  $k_{\max} = 1$  esetén

$$P_{\gamma c, p} = - \left[ \frac{3b}{b+1} \right]^{\frac{1}{2}} f_1(cb) P_{m,m}. \quad (70)$$

d) IV. Példa  $a=0, b=j_n=\frac{1}{2}, l_n=1, c=\frac{1}{2}, L=L'=1$ .

$$P_p = -\frac{1}{3} P_{l_n},$$

$$W(\vartheta_\gamma, \varphi_\gamma) = \text{konstans},$$

$$P_{m,m} = P_{l_n},$$

$$P_{\gamma c, p} = P_{l_n},$$

$$P_{\gamma c, p} = -3P_p.$$

#### V. A síkhullámú Born-közelítés (Plane Wave Born Approximation, Butler-közelítés)

Az eddigiekben a különböző korreláció-függvényeket a  $\mathcal{Q}_{k\kappa}(l_n l'_n)$  statisztikus tenzorokkal fejeztük ki. A korrelációk explicit megadásához most szükség van tehát  $\mathcal{Q}_{k\kappa}(l_n l'_n)$  meghatározására. Az eddigi levezetésekben, melyeknek eredményeit a 63–70 képletekben foglaltuk össze, a leglényegesebb elhanyagolás a diszorziók spintől függő részének az elhanyagolása volt. A következőkben azonban további megszorító feltevéseket kell alkalmaznunk a  $\mathcal{Q}_{k\kappa}(l_n l'_n)$  statisztikus tenzorok megadásához.

A stripping reakció elméletében legelőször használt modell a PWBA modellje. Itt az alapfeltevés az, hogy sem a beeső deuteronhullám, sem a kifutó protonhullám nem szenved torzítást, tehát mindkét hullámot síkhullámnak vehetjük fel. Ekkor tehát a 18 képletben felírt  $B_{l_n l'_n}$ -ben szereplő  $\varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \mathbf{r}'_p)$  és  $\varphi_d^{(+)}(\mathbf{k}_d, \mathbf{r}_d)$  függvények a következő alakúak lesznek:

$$\varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \mathbf{r}'_p) = e^{-i\mathbf{k}_p \mathbf{r}_p} = e^{-i\mathbf{k}_p \left( \mathbf{r}_p - \frac{M_n}{M_B} \mathbf{r}_n \right)}, \quad (71)$$

$$\varphi_d^{(+)}(\mathbf{k}_d, \mathbf{r}_d) = e^{i\mathbf{k}_d \mathbf{r}_d} = e^{i\mathbf{k}_d (\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_p)/2}, \quad (72)$$



ahol  $M_n$  a neutron,  $M_B$  a  $B$  maradék mag tömege. További feltevésként még a  $V_{np}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p)$  kölcsönhatást is a Fermi-féle pszeudo-potenciállal helyettesítjük:

$$V_{np}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p)\psi_d(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p) = g\delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p), \quad (73)$$

ahol

$$g = -\sqrt{8\pi\kappa_d} \frac{\hbar^2}{2M_{np}}, \quad (74)$$

$$\frac{\hbar^2}{2M_{np}}\kappa_d^2 = \text{deuteron kötési energiája,}$$

$M_{np}$  a neutron-proton rendszer redukált tömege.

Ezeket a kifejezéseket 18-ba helyettesítve,  $B_{l_n\lambda_n}$  a következőnek adódik:

$$B_{l_n\lambda_n} = g \frac{i^{-l_n}}{\hat{l}_n} \int e^{i\left(\mathbf{k}_d - \frac{M_A}{M_B}\mathbf{k}_p\right)\mathbf{r}} Y_{l_n\lambda_n}^*(\hat{\mathbf{r}}) u_{l_n}(r) r^2 dr d\Omega.$$

Fejtsük sorba az itt szereplő síkhullámot gömbhullámok szerint:

$$e^{i\left(\mathbf{k}_d - \frac{M_A}{M_B}\mathbf{k}_p\right)\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}),$$

ahol  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_d - \frac{M_A}{M_B}\mathbf{k}_p$  a targetmagnak átadott impulzus hullámvektora, és  $k = |\mathbf{k}|$ .

E sorfejtett alakot helyettesítve az integrálba, a szögek szerinti integrálást elvégezhettük. A gömbfüggvények orthogonalitása miatt ekkor az összegből csak egy tag marad meg. Így  $B_{l_n\lambda_n}$ -re a következő kifejezés adódik:

$$B_{l_n\lambda_n} = g \frac{4\pi}{\hat{l}_n} Y_{l_n\lambda_n}^*(\hat{\mathbf{k}}) \int_{R_0}^{\infty} j_{l_n}(kr) u_{l_n}(r) r^2 dr. \quad (75)$$

Itt az  $r$  szerinti integrálás alsó határát  $R_0$ -nak vettük, ahol  $R_0$  a mag sugár. Ez a Butler elméletben bevezetett újabb feltevés. Indokolására Butler azt hozta fel, hogy azok a deuteronok, melyek bejutnak a mag belsejébe, közbülső magot hoznak létre. Ezért a stripping reakcióhoz a mátrixelemnek csak az a része ad járulékot, mely a magon kívüli részre való integrálásból származik. Ez az érvelés azonban nem egészen fogadható el a mai optikai-moddell vizsgálatok fényében. Ezek szerint ugyanis tudjuk, hogy a deuteron és a proton szabad úthossza a magon belül elég nagy. Látható tehát, hogy  $R_0$  bevezetése nem mentes az önkénnytől, és így nem is várható, hogy a formulának a kísérleti adatokhoz való illesztésénél  $R_0$ -ra pontosan a magsugarat kapjuk. A kísérletek analízise valóban azt mutatja, hogy  $R_0$  helyébe a más mérésekből meghatározott magsugárnál lényegesen nagyobb értéket kell beírni, hogy a formulák leírják a szögeloszlásokat.

A 75. képletben szereplő radiális integrál a  $j_{l_n}(kr)$  és az  $u_{l_n}(r)$  függvényekre vonatkozó differenciálegyenletek felhasználásával kiszámítható [10]:

$$\int_{R_0}^{\infty} j_{l_n}(kr) u_{l_n}(r) r^2 dr = \frac{R_0^2 u_{l_n}(R_0)}{k^2 + t_n^2} \left[ \frac{d}{dr} j_{l_n}(kr) - j_{l_n}(kr) \frac{1}{h_{l_n}^{(1)}(it_n r)} \frac{d}{dr} h_{l_n}^{(1)}(it_n r) \right]_{r=R_0}, \quad (76)$$

ahol  $\hbar^2 t_n^2 / 2M_n^*$  a maradék magban kötött neutron kötési energiája és  $M_n^*$  a neutron redukált tömege a magban;  $h_{l_n}^{(1)}(it_n r)$  a képzetes argumentumú, elsőfajú szférikus Hankel függvény;  $h_{l_n}^{(1)}$  a kötött neutron radiális hullámfüggvénye a mag potenciál-terén kívül.

Térjünk most vissza  $B_{l_n \lambda_n}$  75-ben felírt kifejezéséhez. Válasszuk meg koordináta-rendszerünket úgy, hogy a  $Z$  tengely mutasson  $\mathbf{k}$  irányába. Ekkor  $Y_{l_n \lambda_n}(\mathbf{k}) = Y_{l_n \lambda_n}(0, 0) = \frac{\hat{l}_n}{\sqrt{4\pi}} \delta_{\lambda_n, 0}$ . Ezért tehát, az ebben a koordináta-rendszerben felírt  $B_{l_n \lambda_n}$ , melyet  $\overset{\circ}{B}_{l_n \lambda_n}$ -rel jelölünk, arányos  $\delta_{\lambda_n, 0}$ -val:

$$\overset{\circ}{B}_{l_n \lambda_n} \sim \delta_{\lambda_n, 0}. \quad (77)$$

Ezért a belőle a 21 képlet szerint képezett statisztikus tenzor:

$$\begin{aligned} Q_{k\lambda}(l_n l'_n) &= \sum_{\lambda_n \lambda'_n} (-1)^{l'_n - \lambda'_n} (l_n \lambda_n, l'_n - \lambda'_n | k\lambda) \overset{\circ}{B}_{l_n \lambda_n} \overset{\circ}{B}_{l'_n \lambda'_n}^* = \\ &= (-1)^{l'_n} (l_n 0, l'_n 0 | k0) \delta_{\lambda, 0} \overset{\circ}{B}_{l_n 0} \overset{\circ}{B}_{l'_n 0}^*. \end{aligned} \quad (78)$$

Az itt felírt  $(l_n 0, l'_n 0 | k0)$  Clebsch—Gordan együttható csak akkor nem nulla, ha  $l_n + l'_n - k = \text{páros}$ . Másrészt a paritás megmaradás miatt kell, hogy  $l_n + l'_n = \text{páros}$  legyen mindig. Ebből következik, hogy  $k$  is páros kell, hogy legyen. Mivel továbbá F 3 szerint egy tetszőleges koordináta-rendszerbe való áttérésnél egy adott  $k$ -jú statisztikus tenzor ugyanazon  $k$ -jú statisztikus tenzorba transzformálódik, ezért minden koordináta-rendszerben igaz, hogy:

$$Q_{k\lambda}(l_n l'_n) = 0, \text{ ha } k = \text{páratlan} \quad (79)$$

A 75, 76 és 78 egyenleteknek felhasználásával 64-ből a differenciális hatáskereszt-metszetre a következő kifejezés adódik:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\vartheta_p)}{d\Omega} &= \frac{2M_d^* M_p^* (2b+1) \varepsilon_d k_p R_0^4}{M_{np}^* (2a+1) \hbar^2 k_d^2} \frac{1}{(k^2 + t_n^2)^2} \times \\ &\times \sum_{l_n} \theta_{l_n}^2 u_{l_n}(R_0)^2 \left( \frac{d}{dr} j_{l_n}(kr) - j_{l_n}(kr) \frac{1}{h_{l_n}^{(1)}(it_n r)} \frac{d}{dr} h_{l_n}^{(1)}(it_n r) \right)_{r=R_0}^2, \end{aligned} \quad (80)$$

ahol  $\theta_{l_n}^2 = \sum_{jn} \theta_{jn, l_n}^{ba2}$ . A szögfüggést a  $k = \left| \mathbf{k}_d - \frac{M_A}{M_B} \mathbf{k}_p \right|$  hozza be.  $\theta_{l_n}^2$  annak a valószínűsége, hogy a neutron a maradék magban egy  $l_n$  pályaimpulzusmomentumú független részecske állapotban van;  $R_0^2 u_{l_n}(R_0)^2$  a független részecske állapotban levő neutronnak a mag felületén való megtalálási valószínűség-sűrűsége;  $[j_{l_n}(kR_0)]^2$  adja meg, hogy a  $\mathbf{k}$  hullámvektorú síkhullámban a mag felületén milyen valószínűséggel van jelen  $l_n$  impulzusmomentumú állapot; kinematikai összefüggésekkel igazolható, hogy

$$k^2 + t_n^2 = \frac{M_{nA}^*}{M_{np}^*} \left( (\mathbf{k}_p - \frac{1}{2} \mathbf{k}_d)^2 + \kappa_d^2 \right).$$



Így az összegző jel előtti tényezőben felismerhetjük a deuteron hullámfüggvény Fourier-transzformáltját is. A Butler közelítéssel nyert 80. képlet és a bevezetőben nyert képlet hasonlósága mutatja, hogy a stripping reakciók ott vázolt szemléletes képe megfelel a valóságnak.

A 80-ban felírt differenciális hatáskeresztmetszet  $R_0$  megfelelő megválasztásával jól leírja a  $(d, p)$  stripping reakciókból származó protonok szögeloszlását az első maximum környékén. Éppen ezért a Butler-elmélet felhasználásával igen sok mag-nívóra meg lehetett állapítani, hogy a benne kötött utolsó neutronnak mekkora a pályaimpulzusmomentuma. Így a nívók paritását meg lehetett határozni, és a spin-jükre is határokat lehetett megadni az impulzusmomentum vektorokra fennálló

$$\mathbf{b} = \mathbf{a} + \mathbf{l}_n + \frac{1}{2}.$$

egyenlőség alapján.

A szóban forgó impulzusmomentum-értékek meghatározásához további segítséget nyújtott a  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció mérése. 65 és 78 alapján a korreláció-függvény:

$$W(\vartheta_\gamma) = \sum_k f_k(cb) A_k(ab) P_k(\cos \vartheta_\gamma),$$

ahol

$$A_k(ab) = \sum_{\substack{l_n l'_n \\ j_n j'_n}} (-1)^{b-a+\frac{1}{2}+l'_n} \frac{\hat{b}^3 \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n}{2(2a+1)} W(j_n l_n j'_n l'_n; \frac{1}{2} k) \times \\ \times W(j_n b j'_n b; ak) (-1)^{l'_n} (l_n 0, l'_n 0 | k 0) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \hat{B}_{l_n 0} \hat{B}_{l'_n 0}^*,$$

és  $\vartheta_\gamma$  a  $\gamma$  sugár detektálási iránya és a  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_d - \frac{M_A}{M_B} \mathbf{k}_p$  vektor iránya közti szög.

A szögkorreláció az azimut szögtől nem függ. A korreláció szimmetria-tengelye a  $\mathbf{k}$  vektor iránya. A 81 képletben felírt korrelációfüggvény megegyezik a  $\mathbf{k}$  irányú neutronbombázás esetére felírható  $w(\vartheta_\gamma)$  szögkorreláció függvénnyel. Az elvégzett  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció-mérések igen jól értelmezhetők voltak az itt nyert  $w(\vartheta_\gamma)$  függvénnyel, és e mérésekből is sok magnívó spinjét lehetett meghatározni.

A Butler-elmélet a sikerei ellenére számos problémát nem tud megoldani. Annak ellenére, hogy a protonok szögeloszlását a stripping csúcs körül jól leírja, a hatáskeresztmetszet abszolút értékét igen erősen túlbecsüli. Így a 80 képlet segítségével meghatározott  $\theta_{l_n}^2$ -ek nagyságrenddel kisebbnek adódtak a más mérésekből kapott értékeknél. Problematisztikus ezenkívül, mint már említettük, a  $R_0$  magsugárparaméter jelentése. Igen szembetűnő fogyatékozsága továbbá a Butler-elméletnek, hogy a polarizációkról egyáltalán nem tud számot adni. A 79 képlet szerint a  $\varrho_{10}(l_n l'_n)$  statisztikus tenzor nulla. A 64 képletből viszont látjuk, hogy a  $P_p$  protonpolarizáció éppen a  $\varrho_{10}(l_n l'_n)$  tenzorokkal arányos. A  $\gamma$  cirkuláris polarizáció kifejezése úgyszintén csak a páratlan  $k$ -jú  $\varrho_{k0}(l_n l'_n)$  tenzorokat tartalmazza a számlálóban. Látjuk tehát, hogy a Butler-közelítésben

$$P_p = P_{\gamma c.p.} = P_{m,m.} = 0. \quad (82)$$

A kísérletileg talált jelentős protonpolarizációk tehát világosan mutatják, hogy a Butler-elméletben meg nem engedhető közelítések vannak. A PWBA-ban használt legdurvább közelítő feltevések elhagyására dolgozták ki a stripping reakciók CFDWBA modelljét.

VI. A torzított hullámú közelítés  
(Distorted Wave Born Approximation)

Az előző fejezetben tárgyalt PWBA legkevésbé jogosult két közelítése a proton és deuteronhullámok síkhullámokkal való helyettesítése (71, 72 képletek), és a mag belsejének a kirekesztése az integrációs tartományból a  $B_{l_n \lambda_n}$  mátrixelem számításánál. E két közelítést javítja a stripping reakciók DWBA modellje. E modellben a  $\varphi_p^{(-)}(\mathbf{k}_p, \mathbf{r}_p)$  és a  $\varphi_d^{(+)}(\mathbf{k}_d, \mathbf{r}_d)$  hullámfüggvények oly alakját használjuk, mely figyelembe veszi a proton és végmag, a deuteron és targetmag közti kölcsönhatásokat. A kezdeti ill. végmag optikai potenciálján szórt hullámokat leíró függvényekkel közelítjük a  $\varphi_p^{(-)}$  és  $\varphi_d^{(+)}$  függvényeket. Mármost attól függően, hogy a disztortáltó optikai potenciálhoz a spin-pálya kölcsönhatást leíró  $\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}$  tagot hozzávesszük-e vagy sem, kapjuk az általános DWBA vagy a CFDWBA = Central Force DWBA modellt. A spin-pálya kölcsönhatás figyelembe vétele igen erősen elkomplikálja a számítást. Általános összefüggések valamennyire is zárt alakban nem nyerhetők belőle, s csak nagyteljesítményű számítógépek segítségével lehet bármit is kiszámítani e modellben. Ezenkívül még a CFDWBA modell használhatóságának határai sincsenek kellőképpen tisztázva. Ezen okok miatt szorítkozunk a CFDWBA modelljére a következőkben.

A  $B_{l_n \lambda_n}$ -ben szereplő függvényeinkre tehát most az F 18-ban felírt alakot használjuk:

$$\begin{aligned} \varphi^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \mathbf{r}_p) &= \varphi^{(+)}(-\mathbf{k}_p, \mathbf{r}_p) = \\ &= \frac{4\pi}{k_p r_p} \sum_{l_p \lambda_p} i^{l_p} e^{i\sigma_{l_p}} f_{l_p}(k_p r_p) Y_{l_p \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_p) Y_{l_p \lambda_p}^*(-\hat{\mathbf{k}}_p), \end{aligned} \quad (83)$$

$$\varphi^{(+)}(\mathbf{k}_d, \mathbf{r}_d) = \frac{4\pi}{k_d r_d} \sum_{l_d \lambda_d} i^{l_d} e^{i\sigma_{l_d}} g_{l_d}(k_d r_d) Y_{l_d \lambda_d}(\hat{\mathbf{r}}_d) Y_{l_d \lambda_d}^*(\hat{\mathbf{k}}_d). \quad (84)$$

Az itt szereplő  $f_{l_p}$  és  $g_{l_d}$  radiális függvények F 19 szerint a

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr_p'^2} + \frac{l_p(l_p+1)}{r_p'^2} + \frac{2M_p^*}{\hbar^2} \bar{V}_p(r_p') - k_p^2 \right\} f_{l_p}(k_p r_p) = 0 \quad (85)$$

és

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr_d^2} + \frac{l_d(l_d+1)}{r_d^2} + \frac{2M_d^*}{\hbar^2} \bar{V}_d(r_d) - k_d^2 \right\} g_{l_d}(k_d r_d) = 0 \quad (86)$$

differenciálegyenleteknek tesznek eleget. Itt  $\bar{V}_p(r_p')$  és  $\bar{V}_d(r_d)$  a protonra és a deuteronra ható optikai + Coulomb-potenciálok. Az  $f_{l_p}(k_p r_p)$  és a  $g_{l_d}(k_d r_d)$  függvények asszimptotikus alakját az F 20 képletben írtuk fel.

A  $V_{np}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p)$  neutron-proton kölcsönhatásra továbbra is a 73-ban felírt közelítést használjuk. Helyettesítsük tehát a 73 kifejezést, valamint  $\varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \mathbf{r}_p)$  és  $\varphi_d^{(+)}(\mathbf{k}_d, \mathbf{r}_d)$  83 és 84 alakját a  $B_{l_n \lambda_n}$  18-beli képletébe. Ekkor a szögekre rögtön kiintegrálhatunk a három gömbfüggvény szorzatának integráljára vonatkozó

$$\int Y_{l_p \lambda_p}^*(\Omega) Y_{l_n \lambda_n}(\Omega) Y_{l_d \lambda_d}(\Omega) d\Omega = \frac{\hat{l}_p \hat{l}_n}{\sqrt{4\pi} \hat{l}_d} (l_p 0, l_n 0 | l_d 0) (l_p \lambda_p, l_n \lambda_n | l_d \lambda_d)$$



egyenlőség felhasználásával. Ezek után  $B_{l_n \lambda_n}$  alakja a következő lesz:

$$B_{l_n \lambda_n} = \frac{(4\pi)^{3/2} g}{k_p k_d \left(1 - \frac{M_n}{M_B}\right)} \sum_{l_p \lambda_p} i^{l_d - l_p - l_n} e^{i(\sigma_{l_d} + \sigma_{l_p})} \frac{\hat{l}_p}{\hat{l}_d} (l_p 0, l_n 0 | l_d 0) (l_p \lambda_p, l_n \lambda_n | l_d \lambda_d) \times \\ \times Y_{l_p \lambda_p}(\hat{\mathbf{k}}_p) Y_{l_d \lambda_d}^*(\hat{\mathbf{k}}_d) \int f_{l_p}(k_p r') u_{l_n}(r) g_{l_d}(k_d r) dr, \quad (87)$$

ahol  $r' = \left(1 - \frac{M_n}{M_B}\right)r$ . Vegyük fel most koordináta-rendszerünket úgy, hogy  $Z$  tengelye  $\mathbf{k}_d$  irányába mutasson. Ekkor  $Y_{l_d \lambda_d}(\hat{\mathbf{k}}_d) = \frac{\hat{l}_d}{\sqrt{4\pi}} \delta_{\lambda_d, 0}$ . Ebben a koordináta-rendszerben felírt  $B_{l_n \lambda_n}$ -et  $\bar{B}_{l_n \lambda_n}$ -sal jelöljük. Írhatjuk tehát, hogy

$$\bar{B}_{l_n \lambda_n} = \frac{4\pi g}{k_p k_d \left(1 - \frac{M_n}{M_B}\right)} \sum_{l_p \lambda_p} i^{l_d - l_p - l_n} e^{i(\sigma_{l_d} + \sigma_{l_p})} \hat{l}_p (l_p 0, l_n 0 | l_d 0) (l_p \lambda_p, l_n \lambda_n | l_d 0) \times \\ \times Y_{l_p \lambda_p}(\vartheta_p, 0) f(l_p l_n l_d), \quad (88)$$

ahol

$$f(l_p l_n l_d) = \int_0^\infty f_{l_p}(k_p r') u_{l_n}(r) g_{l_d}(k_d r) dr. \quad (89)$$

Itt egyelőre az integrálás alsó határát még nem vettük nullának. Most összefoglaljuk a stripping reakciók CFDWBA modelljében használt különböző közelítő eljárásokat. Ezek csak a 89-ben  $B_{l_n \lambda_n}$ -ben közelebbről a felírt  $f(l_p l_n l_d)$ -ben különböznek egymástól. Az  $f(l_p l_n l_d)$  integrálok attól függenek, hogy a benne szereplő függvények 85 és 86 differenciál egyenletében  $\bar{V}$  helyébe milyen potenciálokat írunk, és hogy az integrálás alsó határát,  $q$ -t, minek választjuk.

1.  $q = R_0$ ,  $\bar{V}_p = \bar{V}_d = 0$ : síkhullámú Butler közelítés (ekkor az előző fejezet eredményeit kapjuk vissza);

2.  $q = R_0$ ,  $\bar{V}_p$  és  $\bar{V}_d$  Coulomb potenciálok: „Butler + Coulomb” közelítés;

3.  $q = R_0$ ,  $\bar{V}_p$  és  $\bar{V}_d$  optikai + Coulomb potenciálok: DWBA levágással („cut off DWBA”);

4.  $q = 0$ ,  $\bar{V}_p$  és  $\bar{V}_d$  optikai + Coulomb potenciálok: DWBA levágás nélkül.

A 88-ban felírt  $\bar{B}_{l_n \lambda_n}$ -et tovább nem egyszerűsíthetjük. Csak számítógéppel számítható ki. E számítások eredményei a következők:

1. Az így kiszámolt hatáskeresztmetszet abszolút értéke elég jó egyezésben van a tapasztalattal.

2. A protonok általában polarizáltak; a polarizáció szögfüggése igen erős lehet.

3. A protonok szögeloszlása a mért szögeloszlásokkal jó egyezést mutat.

Általánosabb megfontolások alapján  $l_n = 1$  esetére Satchler és Tobocman [11] megmutatták, hogy a  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció szimmetriatengelye a disztorció hatására elfordul, és az iránykorreláció aszimmetriája csökken. Menyhárd és Zimányi [12] kimutatták, hogy a disztorció hatására a  $\gamma$ -sugárzás lineáris polarizáció-síkja is elfordul, és a lineáris polarizáció nagysága csökken.

Itt külön kiemeljük, hogy az V. fejezetben nyert képletek érvényesek bármely spintől független disztorció esetén. Az egyes korrelációk, például a  $P_p$  protonpolarizáció és a  $P_{\gamma c.p.}$   $\gamma$  cirkuláris polarizáció külön-külön függnék attól, hogy a disztortáló potenciált milyen alakúnak, milyen paramétersereggel jellemzettnek vettük fel. A köztük felírható összefüggések azonban az esetek nagy részében függetlenek a disztortáló potenciál konkrét alakjától. Így annak tisztázására, hogy a CFDWBA alapfeltevései mennyire helytállóak, a legmegfelelőbb mérni a protonpolarizációt és a  $\gamma$ -cirkuláris polarizációt, s azt vizsgálni, hogy viszonyuk mennyire egyezik meg a CFDWBA modellje alapján számítottal.

### VII. A stripping reakciók elméletének új irányai

Végezetül még röviden áttekintjük a stripping reakciók értelmezésére és felhasználására irányuló újabb törekvéseket.

A PWBA-nak a kísérletek jobb kiértékelésére való felhasználására két próbálkozás történt. Bowcock [13] szerint a következő eljárást követhetjük. A differenciális hatáskeresztmetszet négyzetgyökét sorbafejtjük Legendre polinomok szerint. Feltehető, hogy a disztorció csak az alacsonyabb  $k$  indexű Legendre-polinomok együtthatóit befolyásolja jelentősen (ez lényegében azt a feltevést jelenti, hogy a magasabb parciális hullámok disztorciója elhanyagolható). Fejtsük tehát sorba Legendre-polinomok szerint mind a kísérletileg mért, mind pedig a PWBA-val számított differenciális hatáskeresztmetszet négyzetgyökét, és képezzük az azonos  $k$  indexű polinomok együtthatóinak hányadosát. Azt várjuk, hogy ezen hányadosok növekvő  $k$ -val konstans értékhez tartanak. Mivel a  $\sqrt{\sigma_{\text{elm}}}$  felbontásában minden egyes tag tartalmazza szorzóként  $\theta_{j_{in}}^{ba}$ -et, ezért a konstansból, melyhez a hányadosok tartanak, megkaphatjuk  $\theta_{j_{in}}^{ba}$  helyes értékét.

Amado más eljárást javasolt [14]. A PWBA-val számolt reakció-mátrixelemben (75–76 képletek) szerepel a  $[(\mathbf{k}_d - \frac{1}{2}\mathbf{k}_p)^2 + \kappa_d^2]^{-1}$  tényező. A hatáskeresztmetszet pontos számításánál nyilván sok más mátrixelemet is figyelembe kellene vennünk. Elég azonban egyetlen mátrixelemet megtartanunk, ha annak éppen szinguláris helye körül vagyunk. Exakt leírja tehát a PWBA a stripping reakciót, ha mátrix-eleme szinguláris. Ez akkor következik be, ha

$$\left(\mathbf{k}_d - \frac{1}{2}\mathbf{k}_p\right)^2 + \kappa_d^2 = k_d^2 + \frac{1}{4}k_p^2 - k_d k_p \cos \vartheta_{dp} + \kappa_d^2 = 0 \quad (90)$$

egyenlőség fennáll. Természetesen ez az eset a szögek és impulzusok fizikai tartományában nem fordulhat elő. A 90 egyenlőség azonban valamely  $\cos \vartheta_{dp} > 1$  érték-nél már teljesülhet. Így tehát, ha a kísérletileg mért hatáskeresztmetszetet  $\cos \vartheta_{dp}$  függvényében ábrázoljuk, és extrapoláljuk, arra a  $\cos \vartheta_{dp}$  értékre, melynél a 90 egyenlőség teljesül, akkor az ezúton meghatározott „kísérleti” hatáskeresztmetszet a PWBA-val számítottal meg kell, hogy egyezzen, s így ismét megkaphatjuk  $\theta_{j_{in}}^{ba}$  pontos értékét a mért differenciális hatáskeresztmetszetből. Természetesen itt bizonytalanságot okoz a mért szögeloszlás folytatása  $\cos \vartheta_{dp} > 1$  értékeire.

Amado gondolatából indult ki I. S. Shapiro [15]. Azt vizsgálta, hogy a stripping reakciók mátrixelemeinek milyen analitikus tulajdonságai vannak. Mint ismeretes,



egy komplexváltozós függvényt teljesen meghatároznak a szingularitásai. *Shapiro* a stripping mátrixelemnek, mint komplexnek tekintett energia és impulzus-átadás függvényének a szingularitásait, azok típusát és helyét kereste. Az egyszerűbb szingularitások helyét egyszerű kinematikai összefüggésekkel meg tudta adni. Így *Shapiro* elmélete segítségével meg tudjuk határozni, hogy egy adott stripping reakció esetén a PWBA-nak megfelelő pólus és az egyéb folyamatokhoz tartozó szingularitások hol helyezkednek el. Ha PWBA-nak megfelelő pólus közel van a fizikai tartományhoz, és az egyéb szingularitások elég távol vannak, akkor a PWBA jó közelítést kell, hogy adjon. Ha azonban ez a pólus távol van a fizikai tartománytól, vagy pedig a közelében más szingularitások is vannak, akkor nem várhatjuk, hogy a PWBA közelítés jó legyen. Így találjuk meg annak a magyarázatát is, hogy a PWBA-val számított proton-szögeloszlás miért jó a kis szögeknél, és miért nem jó a nagy szögeknél: a kis szögértékek közelebb vannak a PWBA mátrixelem  $\cos \theta_{dp} > 1$ -nél levő pólusához.

Megemlíttük még, hogy bizonyos esetekben az impulzuszórántum és a paritás megmaradása miatt a stripping reakció nem mehet végbe az ismertetett módon. *Menyhárd* és *Zimányi* az ilyen esetben szerephez jutó „tiltott stripping reakció”-kat vizsgálta [16].

## Kísérleti rész

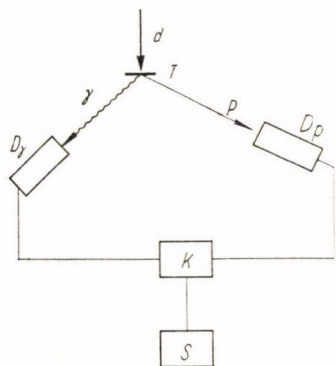
### I. Bevezetés

A stripping reakciók mechanizmusának vizsgálatára kísérletsorozatot kezdtünk el. Kísérleteink célja, hogy a különböző polarizációk és korrelációk között az elméleti részben felírt összefüggések helyességét kísérletileg megvizsgáljuk. Legfőbb célként azt választottuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatás jelentőségét vizsgáljuk. E célból először a  $\gamma$ -sugarak cirkuláris polarizációjának mérését kezdtük el. Mint a továbbiakból ki fog tűnni, ez a mérés igen nehéz. Így az elmúlt három év során egyre újabb és nagyobb teljesítőképességű elektronikus berendezéseket állítottunk üzembe. Ennek köszönhető, hogy az első mérésünknel jelentkező nagy statisztikus hiba egyre kisebbre (illetve a körülményekhez képest kisebbre) volt lezorítható. Jelenleg egy igen nagy működési gyorsaságú automatikus mérőberendezéssel folytatjuk méréseinket. E berendezéssel első mérésünket a drezdai ciklotron mellett végeztük. E mérésnek célja nagy részben az is volt, hogy kipróbáljuk, lehet-e ilyen típusú méréseket ciklotronnal végezni. Az eddigi mérések, bár konkrét adatokat is szolgáltatnak, inkább csak a stripping reakciók mechanizmusát vizsgáló mérésorozat előkészítő méréseinek tekinthetők.

### II. A mérés elve

Mint az az elméleti részből kitűnik, csak az a  $\gamma$ -sugárzás lehet cirkulárisan polárizált, mely oly magokból jön, melyek egy adott irányba távozó protonsugárzás után maradnak hátra. Ha a távozó protonok irányát nem rögzítjük, tehát az összes  $\gamma$ -sugárzást mérjük, cirkuláris polarizációt nem kaphatunk. Világos tehát,

hogy a  $\gamma$ -kvantumokat egy adott irányba távozó protonokkal koincidenzában kell detektálnunk, s ezeknek a koincidáló  $\gamma$ -kvantumoknak a cirkuláris polarizációját kell meghatározni. Egyszerű szimmetriamegfontolásból következik, hogy a  $\hbar\mathbf{k}_d$  és  $\hbar\mathbf{k}_p$  deuteron ill. protonimpulzus-vektorok által meghatározott síkban cir-



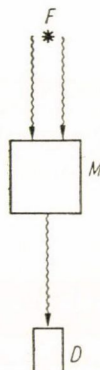
2. ábra. A mérés elvi vázlata.  $T$  target,  $D_p$  protondetektor;  $D_\gamma$  a cirkuláris polarizációra érzékeny  $\gamma$ -detektor;  $k$  koinciden-cia kör;  $s$  számláló

gon való abszorbeáltatása. A  $\gamma$ -elektron-szórás teljes hatáskereszt metszete ugyanis függ az elektron és a  $\gamma$ -kvantum relatív polarizációjától [17]:

$$\sigma = \sigma_0 - \pi_e \pi_e \sigma_1. \quad (92)$$

Itt  $\sigma_0$  a jól ismert Compton-szórás teljes hatáskeresztmetszet;  $\sigma_1$  a polarizációtól függő tag,  $\pi_\gamma + 1$  ill.  $-1$  a jobbra ill. balra cirkulárisan polározott foton esetén;  $\pi_e + 1$  ill.  $-1$ , ha az elektron spinje parallel ill. antiparallel a belső  $\gamma$ -kvantum  $\mathbf{k}_\gamma$  hullámvektorával.  $E_\gamma > 0,6$  MeV esetén  $\sigma_1 < 0$ . Most már látható, hogy miként határozhatjuk meg a cirkuláris polarizációt. Mérnünk kell a  $\gamma$ -sugarak abszorpcióját olyan anyagon, melyben legalább részlegesen polarizáltak az elektronok, és meg kell határozni az elektronspin két ellentétes irányú polarizációjához tartozó abszorpció különbségét.

A mágnesezett vasban az elektronok spinje részlegesen polározott. Nézzük meg tehát, hogy milyen lesz az abszorpciója egy telítésig felmágnesezett vasnak. Helyezzünk a  $\gamma$  sugárforrás és a detektor közé egy  $L$  cm hosszúságú, telítésig mágnesezett vasat (3. ábra). A  $P_{\gamma c.p.}$  cirkuláris polarizáltságú nyalámban a fotonok  $\frac{1}{2}(1 + P_{\gamma c.p.})$ -ed része jobbra,  $\frac{1}{2}(1 - P_{\gamma c.p.})$ -ed része balra cirkulárisan polározott. Az analízáló mágnes transzmisszióját kell meghatározni két mágnes-tér irányítás mellett. A sugárforrás felé ill. attól elmutató mágnes-térirány esetén fellépő transzmissziót jelöljük  $T^+$  ill.  $T^-$ -szal. A 92-ben



3. ábra. A cirkuláris polarizáció mérésének az elve.  $F$  a  $\gamma$  sugárforrás;  $M$  az analízáló elektromágnes;  $D$  a  $\gamma$  detektor



felírt szórási hatás keresztmetszet felhasználásával

$$T^{\pm} = \frac{1}{2} \{ (1 - P_{\gamma c.p.}) e^{-NL(\sigma'_0 Z \pm \sigma_1 v)} + (1 + P_{\gamma c.p.}) e^{-NL(\sigma'_0 Z \mp \sigma_1 v)} \}. \quad (93)$$

Itt  $N$  az atomok száma a vas  $1 \text{ cm}^3$ -ében;  $Z$  a vas atomban levő elektronok száma;  $v$  az atomonként polarizálódó elektronok átlagos száma;  $v = 2,06$  [18];  $\sigma'_0$  a hatás keresztmetszetnek a cirkuláris polarizációtól nem függő része (ebbe érthetjük bele a fotoeffektus hatáskeresztmetszetét is). E kifejezésből számíthatjuk az abszorpció aszimmetriáját ( $NL\sigma_1 v \ll 1$  esetén)

$$a = \frac{T^+ - T^-}{T^+ + T^-} = NL\sigma_1 v P_{\gamma c.p.} \quad (94)$$

A cirkuláris polarizáció tehát a mérhető adatokkal kifejezve:

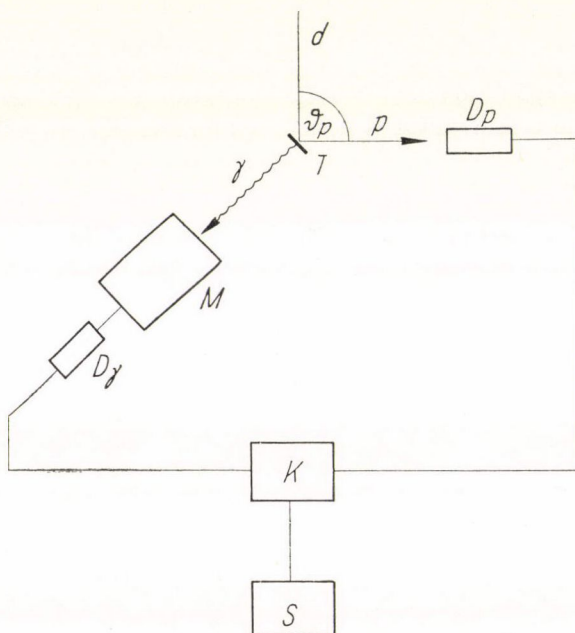
$$P_{\gamma c.p.} = A(E_\gamma) a, \quad (95)$$

ahol

$$A(E_\gamma) = \frac{1}{NL\sigma_1 v}. \quad (96)$$

Az  $A(E_\gamma)$ -nak ez a kifejezése akkor adja helyesen a mért „ $a$ ” aszimmetria és a  $P_{\gamma c.p.}$  közt a kapcsolatokat, ha az  $L$  hosszúságú vas abszorbens teljes hosszában homogén a mágneses tér. A valóságban azonban a vas abszorbens végein inhomogén a tér, és ezért e képletbe egy  $L' < L$  értéket kell helyettesíteni, hogy az „ $a$ ” és  $P_{\gamma c.p.}$  közti kapcsolatot  $A(E_\gamma)$  helyesen adja. Az  $L$  és  $L'$  közti különbség várhatóan elég kicsi. Mivel azonban  $L'$ -t nem határoztuk meg külön méréssel, ezért a méréseink kiértékeléséhez  $A(E_\gamma)$ -nak 96-ban felírt alakját használtuk. Így  $P_{\gamma c.p.}$  értékét egy kissé mindenütt alábecsültük.

A fentiek alapján tehát mérési elrendezésünk a következő lesz (4. ábra). A target és a  $\gamma$  detektor közé elhelyezünk egy elektromágnest. MÉRJÜK a koincidenziák számát a target felé mutató és a targettól elfelé mutató mágnes tér esetén. Az így kapott  $N^+$  és  $N^-$  koincidenzia számból meghatá-



4. ábra. A mérési elrendezés vázlata.  $M$  az analízáló elektromágnes;  $D_p$  és  $D_\gamma$  a proton és a  $\gamma$  detektor;  $k$  koincidenzia kör;  $s$  számláló





a mérést végző emberek teherbírása gátolja, hanem az elektronikus berendezések teherbíróképessége is. A többszáz órás egyfolytábani üzem alatt ugyanis a meghibásodások egyre szaporodnak, míg végülis általános szervízmunkák válnak szükségessé. Így a nagyobb pontosság elérésének egyetlen lehetősége az, hogy adott idő alatt több impulzust dolgoztatunk fel a berendezéssel. Ezért vált szükségessé egyre nagyobb számlálási sebességű berendezések üzembeállítása.

Itt a legújabb berendezés főbb műszaki adatait adjuk meg. Ezt a berendezést Szabó László elektromérnök tervei alapján a KFKI-nek az ugyancsak az ő vezetése alatt álló III. sz. elektronikus műhelye készítette el. A teljes készülék kapcsolási vázlatát az 5. ábra mutatja.

A  $\gamma$ -sugárzást  $1\frac{3}{4}'' \times 1\frac{3}{4}''$ -es, hengeres NaJ(Tl) kristállyal, a protonokat 1 mm vastag, 40 mm átmérőjű NaJ(Tl) kristálykoronggal detektáltuk. Mindkét szcintilláló kristályt RCA 6810/A típusú multiplierhez csatoltuk szilikonzsír segítségével. A multiplierek dinódáihoz szükséges feszültségeket katódkövetős osztólánc segítségével állítottuk elő. Így a multiplierek erősítése nagymértékben függetlenné vált az impulzusok másodpercenkénti átlagos számától. (Egyszerű ellenállásos osztó alkalmazása esetén a multiplier erősítése több mint kettes faktorral változott a rate függvényében). Az osztóláncokat 3 kV-os 10 mA-es stabilizált áramforrás táplálta. A multiplier anódjáról kapott jeleket formálás után a gyorskoincidencia egységre vittük. Az analízátorok számára szükséges jeleket a 11 dinódáról vettük le.

A gyorskoincidencia egység felbontási ideje változtatható. A multiplierek időszórása miatt  $\tau_g = 2,5 \times 10^{-9}$  sec értéket állítottunk be.

Az erősítő által kiadott jelek maximális nagysága 10 V. Az erősítő kimenetén a minimális impulzus emelkedési idő 25 nsec.

A differenciális diszkriminátor analízálási tartománya 0,2 V-tól 10 V-ig terjed. Kapuszelessége folytonosan állítható. Holtideje 80 nsec. Így periodikus jelekből  $10^7$  imp/sec feldolgozására képes.

A differenciális diszkriminátor utáni számlálók első dekádja szintén  $10^7$  imp/sec leszámolására képes periodikus jelek esetén. A második dekád  $10^6$  periodikus imp/sec számlálási sebességű. Az 1 MHz-es dekád kimenete egy választó körön keresztül két számláló bemenetére csatlakozik. (Az 5. ábrán + ill. -szal jelzett számlálók). A váltókörré adott egyenfeszültség határozza meg, hogy a két számláló közül melyikre menjenek tovább a jelek. A hármas koincidencia berendezés felbontási ideje  $\tau_i = 1 \mu\text{sec}$ .

Mind a hármas koincidencia berendezés kimenete, mind pedig a gyorskoincidencia kör kimenete kapukörön keresztül két-két számlálóhoz csatlakozik.

A berendezéshez tartozik egy automatikus vezérlő egység. Ez előre beállított ideig (mérésenként 20 sec-ig) a váltó-körökre oly feszültséget ad, hogy a jelek az egyik (pl. a +) számlálóba menjenek, majd a beállított idő leteltével a számlálást leállítja, az analízáló mágnes gerjesztő áramirányát megfordítja, az 1 MHz-es és a 10 MHz-es előszámlálókat lenullázza, a váltó-köröket átállítja, hogy a jelek a másik (pl. a -) számlálóba menjenek, majd pedig újra indítja a számlálást. Mindezt előre beállítható számszor (mérésünkben harmincszor) ismétli meg. A mérés-sorozat befejeztével teljesen leállítja a számlálást és figyelmeztető hangjelzést ad.

A véletlen koincidenenciák számának a meghatározásához szükséges, hogy az átlag impulzusszám ne változzon túl erősen. Ezért egy a protondetektorra kapcsolt szintírtő alkalmaztunk. Ha az átlagos impulzusszám változása akkora volt, hogy a megadott hibahatárokon (a ciklotronnal végzett mérés esetén  $\pm 20\%$ ) túlmegy, a



számlálást leállítottuk, s csak akkor indítottuk újra, ha a proton rate ismét a kívánt értéket vette fel.

A proton oldalon levő differenciál-diszkriminátor kapujának helyzetét mérés közben is folytonosan kontrolláltuk egy oszcilloszkóppal. Az erősítőből kijövő jeleket késleltető vonalon keresztül az oszcilloszkóp  $Y$  eltérítésére vittük, s az oszcilloszkóp kipp-jét a differenciál-diszkriminátor kimenetéről indítottuk. Így az ernyőn csak azok a jelek jelentek meg, melyek a differenciál diszkriminátort megindították. Mivel a proton spektrum egymástól elkülönülő vonalas szerkezetű volt, így mindig megállapítható volt, hogy a differenciál-diszkriminátor kapujának helye nem csúszott-e el.

A  $\gamma$ -spektrum mérésére, valamint a  $\gamma$ -csatornában levő differenciál-diszkriminátor kapujának beállítására egy koincidencia üzemmódra kapcsolható 100 csatornás amplitúdó analízátort alkalmaztunk. A  $\gamma$ -kapu helyzetét nem folytonosan, hanem csak időnként ellenőriztük.

Az analízáló mágnes 80 mm hosszú, 40 mm átmérőjű Armco vas volt. A mágneses erővonalak lágyvas köpenyben zárulnak.

Az analízáló mágnes szórt tere a multiplierek erősítését befolyásolja, és így szisztematikus, hibás aszimmetriát kapnánk. Ezért az árnyékoló hengerek 3 réteg Permalloy C-ből és két réteg vastagabb lágyvasból készültek. Így az analízáló mágnes gerjesztő áram irányának megfordításakor keletkező mágnes tér változás a multiplier helyén kisebb volt, mint  $2 \cdot 10^{-2}$  Gauss.

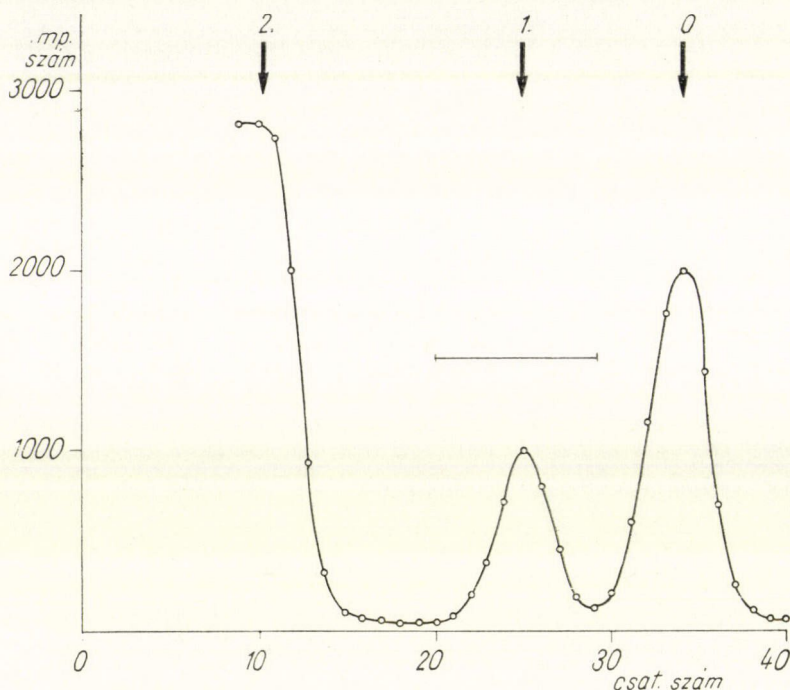
#### IV. Mérések és eredmények

##### 1. $B^{10}(d, p)B_{2,14 \text{ MeV}}^{11*}(\gamma)B_0^{11}$ .

A  $B^{11}$  első gerjesztett nivójára vezető stripping reakciót  $E_d = 420$  keV-os bombázó energiájú deuteronnyalábbal hoztuk létre. A deuteronnyalábot a KFKI 800 kV-os kaszkádgenerátora szolgáltatta. Targetünk nikkel alapra felvitt elemi bór volt, 90%-ra feldúsítva a  $B^{10}$ -es izotópban. A 420 keV-os deuteronok számára targetünk vastag target volt. A protonokat  $\theta_p = 90^\circ$  szög alatt detektáltuk. Protondetektorunk ebben a mérésben 0,7 mm vastagságú pasztik korong volt. A protonspektrum  $\theta_p = 90^\circ$ -nál felvéve a 6. ábrán látható. A differenciál diszkriminátor kapuját az ábrán feltüntetett helyzetbe állítottuk. A  $\gamma$  sugárzást  $1 \frac{3}{4} \times 1 \frac{3}{4}$  -es NaJ(Tl) kristállyal detektáltuk. A  $\gamma$ -spektrumot, az analízáló mágnes után felvéve, a 7b. ábra mutatja. A spektrum elmosódottságát a vastag abszorbens okozza. Az ábrán feltüntetett a  $\gamma$ -csatorna differenciál diszkriminátorának beállítását is. Látható, hogy az általunk keresett  $E_\gamma = 2,14$  MeV-es  $\gamma$ -vonal egyáltalán nem látható a spektrumon. Ennek oka, hogy az első gerjesztett nivóra vezető reakció hatáskeresztmetszete kicsi az összes többi  $\gamma$  termelő reakciók hatáskeresztmetszetéhez képest.

A szórt mágnes tér esetleges hatásának kiküszöbölésére a mérést két geometriában végeztük (8. ábra). Mivel a protondetektor két állását ( $A$  és  $B$ ) a mágnes tér szimmetriatengelye körüli elforgatással kapjuk, ezért a mágnes tér okozta aszimmetria ugyanakkora és ugyanolyan előjelű kell, hogy legyen mindkét esetben. A protonokkal koincidáló  $\gamma$ -sugárzás cirkuláris polarizációja azonban azonos abszolút értékű, de ellentétes előjelű kell, hogy legyen. Így a két esetben mért aszimmetria különbségében csak a  $\gamma$ -sugarak cirkuláris polarizációja miatt fellépő aszimmetria maradhat



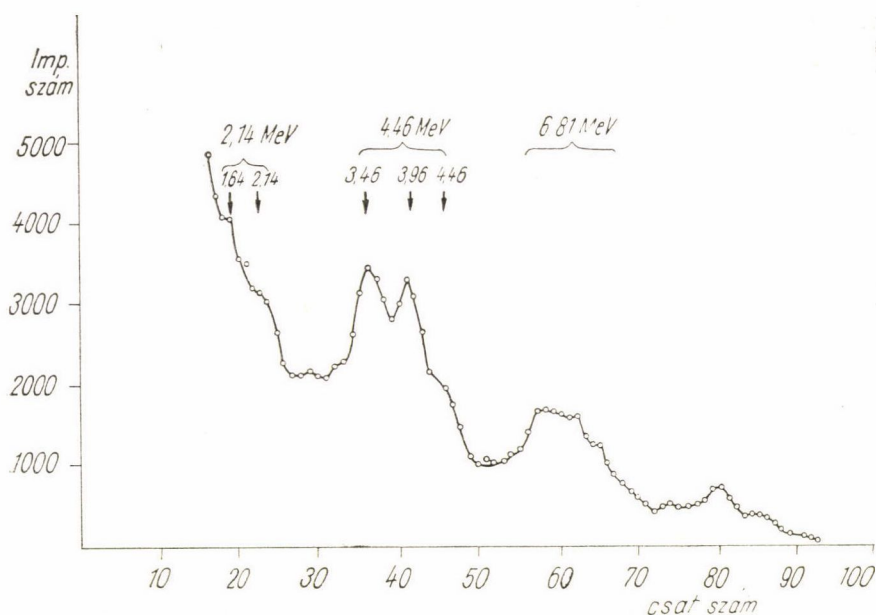


6. ábra. A  $B^{10}(d, p)B^{11}$  reakció protonspektruma.  $E_d = 420$  keV. A 0, 1, 2-vel megjelölt csúcsok az alap, az első és a második gerjesztett állapotra vezető reakciókból származó protonvonalak. A  $\longleftrightarrow$  jel a differenciál-diszkriminátor kapujának a helyét jelöli

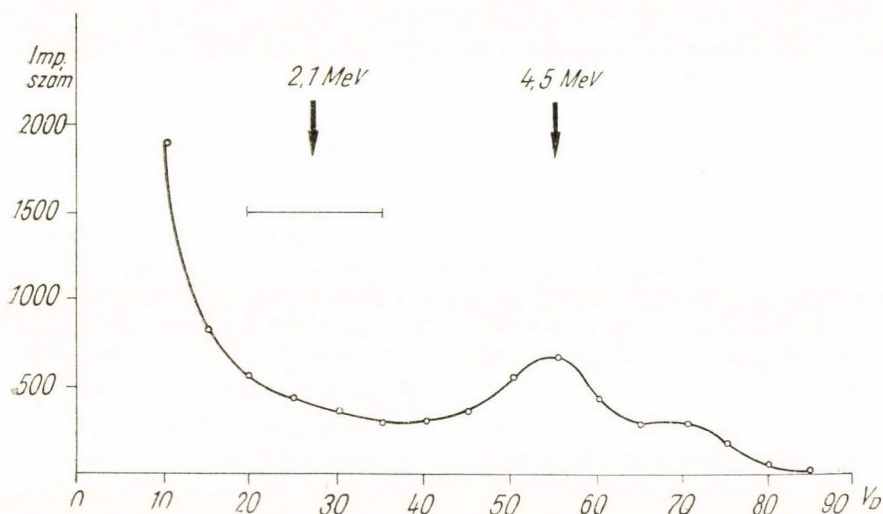
meg. Az elektronikában bekövetkező lassú erősítésváltozások hatásának csökkentésére a mágnes tér irányát minden 200 sec-ben változtattuk. + ill. – jellel jelöljük azokat az impulzusszámokat, melyeket akkor kaptunk, ha az analízáló mágnesben a mágneses erővonalak a target felé ill. attól el mutattak. A mérések eredményét az I. táblázatban adjuk meg. Mivel a gyorsító ingadozása miatt a + és – esetben a protonszámok nem teljesen azonosak, ezért a valódi koinc számot korrigálni

I. TÁBLÁZAT

	$N_{k \text{ valódi}}^+$	$N_{k \text{ valódi}}^-$	$N_p^+$	$N_p^-$	$N_{k \text{ össz.}}^+$	$N_{k \text{ össz.}}^-$	$N_{k \text{ vél.}}^+$	$N_{k \text{ vél.}}^-$	$a \times 10^2$
A geometria	10 712	11 022	$2,562 \cdot 10^8$	$2,554 \cdot 10^8$	13 843	14 049	3 131	3 027	$-1,57 \pm 0,85$
B geometria	8 432	8 315	$2,092 \cdot 10^8$	$2,088 \cdot 10^8$	10 909	10 761	2 477	2 446	$+0,61 \pm 0,97$



7a. ábra. A  $B^{10} + d$  reakcióból származó  $\gamma$ -sugárzás spektruma az analízáló mágnes nélkül felvéve



7b. ábra. A  $B^{10} + d$  reakcióból származó  $\gamma$ -sugárzás spektruma az analízáló mágnes után felvéve



kellett a protonszámokkal. Így az „a” aszimmetria-faktor definíciója

$$a = \frac{\frac{N_{k\text{ val}}^+}{N_p^+} - \frac{N_{k\text{ val}}^-}{N_p^-}}{\frac{N_{k\text{ val}}^+}{N_p^+} + \frac{N_{k\text{ val}}^-}{N_p^-}}.$$

A véletlen koincidenciák számítására az V. Függelékben levezetett F 43 formulát használtuk. A feltüntetett hibák az egyszeres statisztikus hibák. A hiba számításánál csak a számláló hibáját vettük figyelembe, mert ehhez képest a nevező hibája elhanyagolható. Úgyszintén elhanyagolható a normálásra használt protonszám relatív statisztikus hibája a koincidenciaszám relatív hibájához képest. A valódi koincidenciaszám hibája  $[N_{K\text{ össz}} + N_{K\text{ vél}}]^{\frac{1}{2}}$ . Így végülis az aszimmetriára a következő értéket kapjuk:

$$\bar{a} = \frac{1}{2}(a_B - a_A) = +(1,09 \pm 0,64) \cdot 10^{-2}.$$

A 2,14 MeV-os  $\gamma$ -kvantumokra a 95. képletben szereplő A faktor  $A(2,14) = -32,4$  a mi mágnesünkre. Így a 2,14 MeV-es  $\gamma$ -sugárzás cirkuláris polarizációja:

$$P_{\gamma c.p.} = -0,35 \pm 0,21.$$

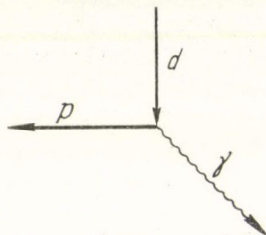
A megadott hiba csak az egyszeres statisztikus hibát tartalmazza.

$$2. B^{10}(d, p)B_{4,46}^{11*}(\gamma)B_0^{11}.$$

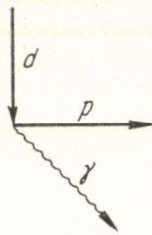
A  $B^{11}$  első gerjesztett állapotát létrehozó stripping reakció relatív gyengesége miatt mindenképpen nehézségbe ütközik nagyobb mérési pontosság elérése. Ezért következő mérésünkben a  $B^{11}$  második gerjesztett nivójára vezető reakciót vizsgáltuk. Mint a 7. ábráról látható, a második gerjesztett állapot bomlásából származó 4,46 MeV-os  $\gamma$ -sugárzás a  $\gamma$  spektrumban jól felismerhető csúcsot ad még az analízáló mágnes után is. Problémát jelentett azonban az  $e$  nivóra vezető protonvonal elkülönítése. A 6. ábrán látható protonspektrumot plasztik detektorral vettük fel. Itt a  $\gamma$ -sugárzás okozta háttér miatt a második gerjesztett állapotra vezető protoncsoport már nem különíthető el a háttértől. Mivel gyorskoincidenenciákat kell létrehozunk, ezért CsJ(Tl) kristályt nem használhattunk, mert az lassú felfutású jeleket ad. Így NaJ(Tl) detektorral kellett próbálkoznunk. A NaJ(Tl) kristály gyorsabb felfutású jeleket ad, mint a CsJ(Tl) kristály, ugyanakkor a háttér szempontjából sokkal előnyösebb, mint a plasztik foszfor. (A plasztik fényhatásfoka protonokra kb. négyszer kisebb, mint elektronokra, míg NaJ(Tl) esetén mindkét részecskére azonos a fényhatásfok.) Itt viszont a NaJ higroszkóposága okoz nehézségeket.

A levegő nedvességétől vékony réteg szilikonsírral tudtuk megóvni a kristályt. Így e mérésben a protonokat 0,8 mm vastag, 30 mm átmérőjű NaJ(Tl) kris-

A geometria



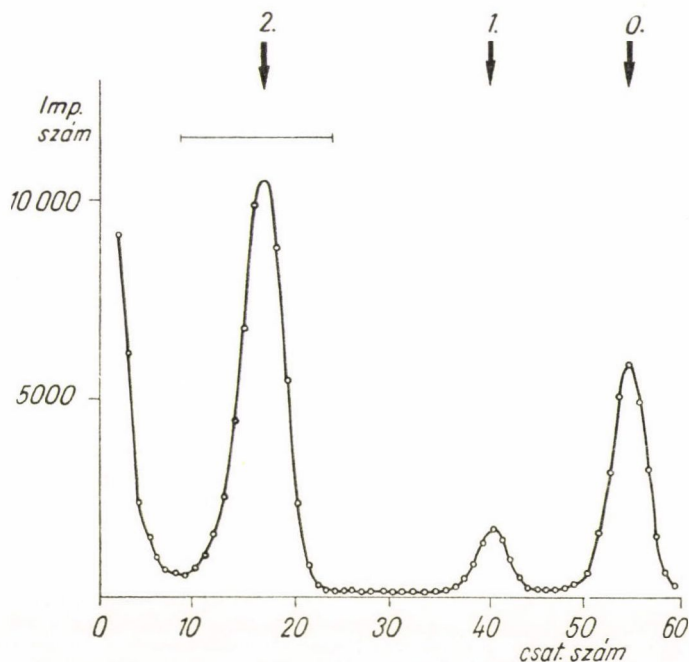
B geometria



8. ábra. A mérés két geometriájának a vázlata

tálylappal detektáltuk. Egy ezzel a detektorral felvett protonspektrumot rajzoltunk fel a 9. ábrán.

E mérésünkben a bombázó deuteron-energia  $E_d=450$  keV volt. Targetünk ismét nikkel alapra felvitt, 90%  $B^{10}$  izotópot tartalmazó elemi bór volt. A felvitt bórréteg a 450 keV-os deuteronok számára vastag targetet képezett. A protonokat



9. ábra. A  $B^{10}(d,p)B^{11}$  reakció protonspektruma  
0,8 mm vastag NaJ(Tl) lappal felvéve

$\theta_p=75^\circ$  alatt detektáltuk. A protoncsatornában a differenciál diszkriminátor kapujának a helyzetét a 9. ábrán feltüntettük. A  $\gamma$ -sugarak detektálására ismét  $1\frac{3}{4} \times 1\frac{3}{4}$ -es NaJ(Tl) egykristályt alkalmaztunk. A  $\gamma$  oldali differenciál diszkriminátor kapuját úgy állítottuk be, hogy a 7. ábrán látható  $\gamma$ -spektrumból a 4,46 MeV-os  $\gamma$ -sugárzásnak megfelelő csúcsot fogja be. A  $\gamma$ -csatorna helyzetének mérés közbeni ellenőrzésére a következő módszert alkalmaztuk (l. 10. ábra). A  $\gamma$  detektorból jövő jeleket egy segéd-differenciál-diszkriminátorba is bevittük, melynek előfeszültségét egy írószerkezet tengelyére csatolt potencióméterről vettük le. Ezen, valamint a mérőágban levő differenciál diszkriminátor kimenetét egy koincidencia-kör bemenetére kapcsoltuk. A koincidencia-kör kimenetét rate-meterre vittük. A rate-meter kimenete vezérelte az írószerkezetet. E berendezés, ha először a koincidencia egységet úgy kapcsoltuk, hogy a segéd diff. diszkriminátor jelei jussanak tovább a rate-meterre, akkor a  $\gamma$ -spektrumot rajzolja fel. Ha pedig koincidenciára állítjuk a koincidencia egységet, akkor az előbb felrajzolt  $\gamma$ -spektrumba belerajzolja a  $\gamma$ -spektrumnak azt a részét, melyre a mérőágban levő differenciál diszkriminátor kimenő jelet



ad. E berendezés működtetése a mérést egyáltalán nem zavarja. Így a mérés során mindig kontrollálhattuk a  $\gamma$ -kapu helyzetét is. A lassú változások hatásának kiküszöbölésére 200 másodpercenként leolvastuk a számlálót, és a mágnes tér irányát megfordítottuk.

A mérést természetesen ismét kétféle geometriával (A és B) végeztük el (l. 8. ábra). A véletlen koincidenciák számát az F 61 képlet segítségével számítottuk. A kapott impulzus-számokat a II. táblázatban tüntettük fel. A két geometriában kapott aszimmetriából képezett eredő aszimmetria értéke:

$$\bar{a} = \frac{1}{2} (a_B - a_A) = -(0,71 \pm 0,25) \cdot 10^{-2}.$$

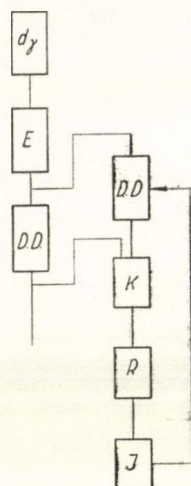
Mivel az  $A(E_\gamma)$  faktor a 4,46 MeV-os sugárzásra  $A(4,46) = -31,3$ , ezért a  $\gamma$  cirkuláris polarizációra a következő értéket kapjuk:

$$P_{\gamma c.p.} = +0,222 \pm 0,078.$$

### 3. $C^{12}(d, p)C_{3,09}^{13*}(\gamma)C_0^{13}$ reakció mérése.

A mérési pontosság további növelésére új elektronikus készüléket állítottunk üzembe. Ennek specifikációit adtuk meg a III. fejezetben. Eddigi méréseinkben azonban más problémánk is volt, éspedig a rendelkezésre álló gyorsító energia alacsonyága. Ezért elhatároztuk, hogy megpróbáljuk méréseinket valamilyen nagyobb energiájú részecskenyalábot szolgáltató gyorsítónál is folytatni. Erre lehetőség is nyílt az NDK és Magyarország Atomenergiabizottságai között megkötött együttműködési megállapodás révén. A drezdai Zentralinstitut für Kernphysik-ben működik egy 13,5 MeV-os energiájú deuteronokat szolgáltató ciklotron. E ciklotron mellé vittük ki újonnan elkészült berendezésünket. Célunk az volt, hogy megállapítsuk, lehetséges-e ilyen típusú méréseket végezni ciklotron mellett.

E mérésnél a bombázó deuteronok energiája tehát  $E_d = 13,5$  MeV volt. A targetet bombázó ionáram erőssége  $I_d = 2,5 \cdot 10^{-8}$  A. Targetünk  $1,8 \text{ mg/cm}^2$  vastagságú, önholdó széntarget volt. A protonokat  $\theta_{\text{lab}} = 45^\circ$  alatt detektáltuk. A  $\gamma$  detek-

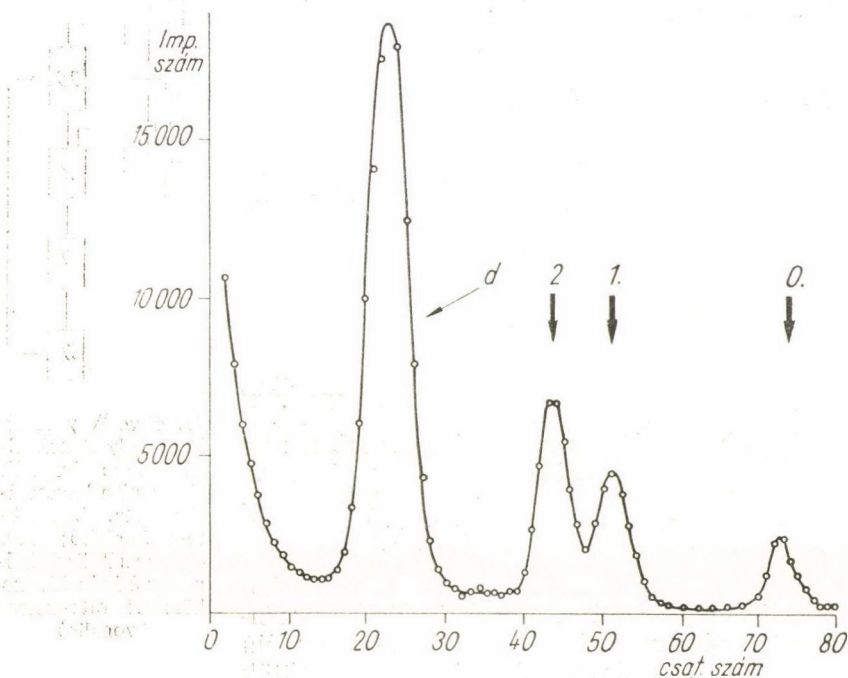


10. ábra. A  $\gamma$  oldali kapu helyzetének ellenőrzésére használt elektronika kapcsolási vázlat.  $d_\gamma$  detektor;  $E$  erősítő;  $D, D$  differenciál-diszkriminátor;  $K$  koincidenca kör;  $R$  rate-meter;  $J$  vonaliró

II. TÁBLÁZAT

	$N_p^+$	$N_p^-$	$N_k^+$ össz	$N_k^-$ össz	$N_k^+$ vél	$N_k^-$ vél	$N_k^+$ val	$N_k^-$ val	$a \cdot 10^2$
A geometria	$7,370 \cdot 10^8$	$7,347 \cdot 10^8$	61 362	60 333	6762	6 728	54 600	53 605	$+0,77 \pm 0,34$
B geometria	$6,990 \cdot 10^8$	$6,995 \cdot 10^8$	53 400	54 081	5922	5 934	47 478	48 147	$-0,66 \pm 0,36$

torunkat ismét a  $(d, p)$  reakciószíkra merőleges irányba állítottuk. A protonok detektálására 1,5 mm vastag, 38 mm átmérőjű, a  $\gamma$ -sugarak detektálására pedig  $1\frac{3}{4}'' \times 1\frac{3}{4}''$  méretű henger alakú NaJ(Tl) egykristályokat használtunk. A háttér csökkentésére a  $\gamma$  detektort ólomtéglával raktuk körül. A detektor és az analízáló mágnes közé 60 mm hosszú, 40 mm furatú Pb kollimátort, a mágnes és a target közé 40 mm hosszú, 20 mm furatú Pb kollimátort helyeztünk el. A reakciókamra Al-ból készült protonablakának falvastagsága  $50 \text{ mg/cm}^2$ . A 11. ábrán látható protonspektrumot

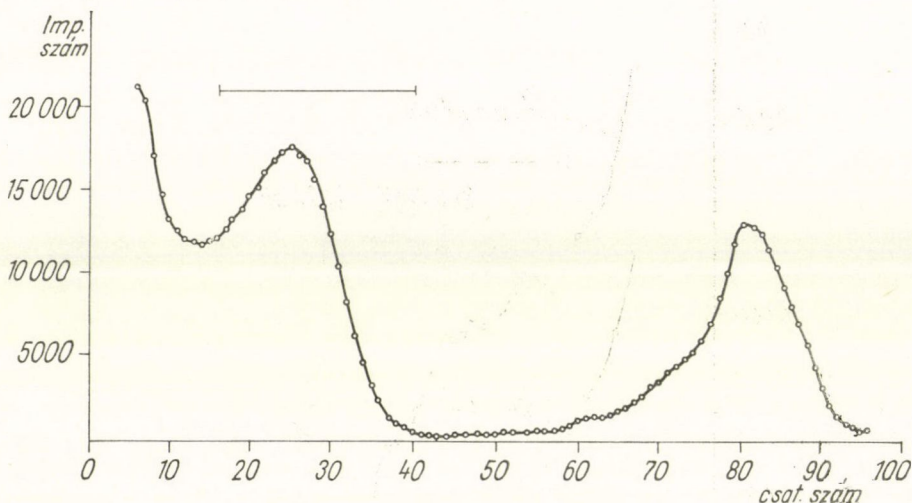


11. ábra. A  $C^{12}(d, p)C^{13}$  reakcióból származó töltött részecskék spektruma  $\theta_{\text{lab}} = 45^\circ$ -nál,  $45 \text{ mg/cm}^2$  Al abszorbenssel felvéve.  $E_d = 13,5 \text{ MeV}$ . A nyilak az alap, az első és a második gerjesztett állapothoz tartozó protonvonalakat, valamint a szórt deuteron-csúcsot jelzik

$50 \text{ mg/cm}^2$  vastagságú Al fólia után vettük fel. 5 mm átmérőjű blendével. Itt az alap, az első és a második gerjesztett állapotra vezető proton-vonalakon kívül jól látszik a szórt deuteron vonal. A koincidenca mérésekhez a proton detektor teljes felületét ki kellett használnunk. Az ekkor kapott rosszabb energia-felbontás miatt a két proton-vonal még jobban egybeesődik. Ezért  $600 \text{ mg/cm}^2$  vastag Al fóliát helyeztünk a detektor elé. Így a két proton-vonal ismét jobban elkülönül. Az így kapott proton-spektrumot mutatja a 12. ábra. Az ábrán feltüntettük a protonoldali differenciál-diszkriminátor kapujának helyzetét is. A mágnes nélkül, valamint az analízáló mágnessel együtt felvett  $\gamma$ -spektrumokat mutatja a 13. ábra. Mindkét spektrumot azonos ( $5 \mu \text{ Coul}$ ) deuteron-töltésmennyiség mellett vettük fel. A két spektrum összehasonlításából látszik, hogy nagy százalékban van jelen olyan háttér-



sugárzás, mely a mágnes behelyezésével sokkal kevésbé gyengül, mint a  $\gamma$ -sugárzás. E háttér egy részét gyors neutronok okozzák. A neutronok egyrészt a NaJ kristályban hoznak létre reakciókat, melyek során töltött részecskék és  $\gamma$ -sugárzás keletkezik, másrészt a  $\gamma$  detektor környezetében levő anyagok felaktiválásából is  $\gamma$ -sugárzást kapunk. A gyors-neutronok egyrészt a targetben a  $C^{12}(d, p)C^{13}$  reakció mellett létrejövő  $C^{12}(d, n)N^{13}$  reakcióból, másrészt a kollimátorokon keletkező öntargeteken létrejövő  $D(d, n)$  reakciókból származnak.

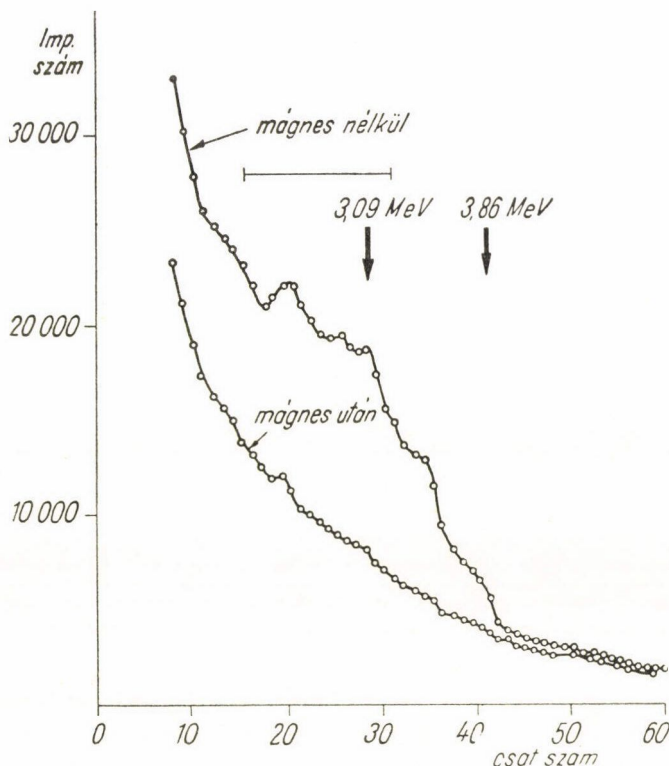


12. ábra. A  $C^{12}(d, p)C^{13}$  reakcióból származó töltött részecskék spektruma  $\theta_{lab} = 45^\circ$ -nál, nagyfelületű detektorral,  $600 \text{ mg/cm}^2$  Al abszorbenssel felvéve. A  $\dashv$  jel a differenciál-diszkriminátorkapujának a helyzetét mutatja

A ciklotronáram instabilitása, valamint az elektronikában bekövetkező lassú változások miatt a vezérlő automatikával 20 sec-ként átváltottuk az analizáló mágnes gerjesztő áramának irányát. A két áramirány esetén kapott impulzusokat két külön számlálósorozatba vezettük. A számlálók holtidőkülönbségeiből adódó téves aszimmetriák elkerülésére a nagy impulzussűrűségű proton és  $\gamma$  csatornában mindkét esetben közös számláló-előfokozatokat használtak (l. 5. ábra). E két gyors dekádát az automatika a mérés újraindítása előtt mindig nullázta és az utána következő számjegyet kerekítette. Mivel egy-egy 20 sec-os periódusban kb.  $10^5$  proton-impulzus és kb.  $10^4$   $\gamma$ -impulzus futott be, ezért e módszerrel a koinc szám normálására használt protonimpulzusszámban maximum  $0,50\%$ , a véletlen koincidenciák számításához felhasznált  $\gamma$  impulzusszámban maximum  $0,5\%$  kerekítési hibát okoztunk egy-egy 20 sec-os mérésben. Azonban az átkapcsolások nagy száma miatt ez a hiba teljesen elhanyagolhatónak tekinthető.

Külön kell még beszélni ebben az esetben a véletlen koincidenciák számának a meghatározásáról. Az V. Függelékben közölt F 45 képlet szerint az effektív  $\tau_{eff}$  amivel a véletlen koincidenciák számát meg kell határoznunk, függ a mindenkor háttérsugárzástól, és így függ a deuteronnyaláb fókuszálási viszonyaitól is. Ez pedig nem volt konstans. Ezért a mérés közben két óránként meghatároztuk a  $\tau_{eff}$ -et. Ez oly módon történt, hogy a protoncsatorna differenciál diszkriminátorát

az alapállapotú protoncsúcsra állítottuk. Az ekkor észlelt koincidenciák csak véletlen koincidenciák lehetnek. A  $\tau_{eff}$  függ a háttér nagyságától és a gyorskoincidenciák  $N_{gy}$  számától. Mivel a protonokat lényegében háttérmentesen detektáltuk, ezért az  $N_\gamma/N_p$  viszony jellemző a háttérre. Így azokban a mérési sorozatokban, melyekben  $N_\gamma/N_p$  és  $N_{gy}$  közel konstans volt, egy közös  $\tau_{eff}$ -vel számolhattunk. Mivel  $\tau_{eff}$ ,



13. ábra. A  $C^{12} + d$  reakcióból származó  $\gamma$ -spektrum az analízáló mágnessel és anélkül felvéve. A  $\longleftrightarrow$  jel a  $\gamma$  diszkriminátor kapujának a helyzetét mutatja

nem függ a proton-rate-től, az előbb ismertetett módon meghatározott  $\tau_{eff}$ -vel számolhattuk a koincidenciamérésben a véletlen koincidenciák számát. Sajnos, a ciklotron természetes pulzációja miatt  $\tau_{eff}$  kb. 15 nsec körül volt, és így a véletlen koincidenciák száma is magas volt. Ezért nem dolgozhattunk olyan nagy impulzus-sűrűséggel, amit a proton és  $\gamma$ -csatornák megengedtek volna. Így a mérésünkben a statisztikus hibát nem tudtuk kellőképpen lecsökkenteni.

A mérést három és fél, ötnapos munkahétben keresztül, napi 24 órában végeztük. A mérés eredményeként kapott impulzusszámokat a III. táblázatban tüntettük fel.



III. TÁBLÁZAT

	$N_p^+$	$N_p^-$	$N_k^+$ össz	$N_k^-$ össz	$N_{k\text{ vél}}^+$	$N_{k\text{ vél}}^-$	$N_{k\text{ val}}^+$	$N_{k\text{ val}}^-$	$a \cdot 10^2$
A geometria	$5,904 \cdot 10^8$	$5,919 \cdot 10^8$	44 277	44 571	16 484	16 520	27 793	28 051	$-0,24 \pm 0,61$
B geometria	$6,765 \cdot 10^8$	$6,762 \cdot 10^8$	48 789	49 180	18 635	18 604	30 154	30 576	$-0,49 \pm 0,66$

A fent ismertetett okok miatt az  $\frac{N_{\text{vél}}}{N_{\text{val}}}$  érték nagy szórást mutatott. Ezért a mérésünk kiértékelésénél az egyes méréssorozatokból (kb. 1500 koincidenciát tartalmazó sorozatok) a súlyozott négyzetek módszerével határoztuk meg az aszimmetriát. Az így kapott  $a$  értékeket tüntettük fel a III. táblázatban is. Az eredőül kapott aszimmetria:

$$\bar{a} = \frac{1}{2} (a_B - a_A) = -(0,13 \pm 0,45) \cdot 10^{-2}.$$

Ebből a  $\gamma$  cirkuláris polarizációra, figyelembe véve, hogy  $A(3,09) = -30,4$ , a következő értéket kapjuk:

$$P_{\gamma c.p.} = +0,039 \pm 0,136.$$

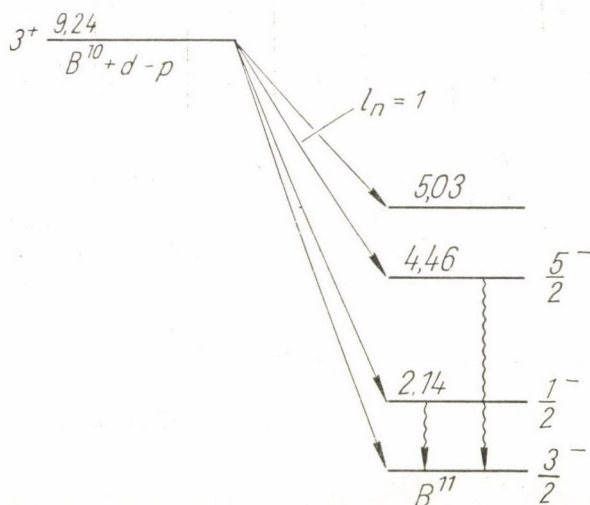
#### V. A mérési eredmények kiértékelése

##### 1. $A B^{10}(d, p) B_{2,14}^{11*}(\gamma) B_0^{11}$ reakció.

A vizsgált  $B^{10} + d$  reakciók áttekinthetősége kedvéért rajzoljuk fel a  $B^{11}$  mag nívórendszerét (14. ábra).

Az első gerjesztett állapotra vezető stripping reakció sok problémát okoz. Az impulzusmomentum és paritásmegmaradás miatt a  $B^{11}$  első gerjesztett állapota csak akkor keletkezhet „megengedett” (normális) stripping reakció révén, ha a befogott neutron pályaimpulzusmomentuma  $l_n = 3$ . Csak ezzel az értékkel kaphatjuk meg az első gerjesztett nívó  $\frac{1}{2}^-$  spin-paritás értékét a  $B^{10}$  targetmag  $3^+$  spin-paritás értékéből. Az atommagok héjmodellje szerint viszont a  $B^{11}$  mag első gerjesztett állapotában az  $l_n = 3$  érték még nem fordulhat elő. Ezért, úgy látszik, ha a stripping reakció mégis létrejön, akkor ez csak valamilyen típusú „tiltott” stripping reakció [19] lehet. A tiltott stripping kifejezés a  $\beta$  bomlással való analógiára utal. A normális stripping reakciónál ugyanis a reakciót létrehozó kölcsönhatást centrálisnak veszik fel. Ez azonban csak közelítés. A kölcsönhatási operátort sorbafejtjük irreducibilis spin és téroperátorok szerint. E sorfejtés első tagja adja a normális, vagy megengedett stripping reakciót, míg a többi tagjai adják a különböző tiltott folyamatokat. A sorfejtés második tagja az elsőrendű spin-tenzort tartalmazza. Az ezáltal létesített kölcsönhatás vezet a spin-flip stripping reakcióra. Ezzel a reakció-típussal próbálta magyarázni Bowcock [20] a  $B^{10}(d, p) B_{2,14}^{11*}$  stripping reakciót. A kölcsönhatási operátornak a helykoordináta függvényében nem centrális részének a reakcióban kifejtett hatását vizsgálta Menyhárd N. és Zimányi J. [19]. A kicseré-

lődési effektusok szerepét pedig French [21] vette figyelembe. Mind e számítások közös jellemzője, hogy a protonok szögeloszlását egy-egy energiatartományban értelmezni tudják, a hatáskeresztmetszet abszolút értékét azonban nem tudják megadni. Ha e reakcióból származó protonok szögeloszlását vizsgáljuk, azt találjuk,



14. ábra. Részlet a  $B^{11}$  mag nívószerkezetének vázlatából

máció, melyet e reakció mechanizmusára vonatkozóan nyerhetünk. Sajnos, még igen kevés mérési adat áll rendelkezésre, és így a reakciómechanizmusra jellemző összefüggéseket még nem lehet kísérletileg megvizsgálni. Az általunk mért cirkuláris polarizáció értékéből így csak a következő adatok vezethetők le. A 61. képlet alapján (jelen esetben  $b = \frac{1}{2}$   $c = \frac{3}{2}$ ):

$$P_{\gamma c.p.} = - \left[ \frac{3 \cdot \frac{1}{2}}{\frac{1}{2} + 1} \right]^{\frac{1}{2}} P_{m.m.} f_1\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) = - P_{m.m.} f_1\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right).$$

Itt  $P_{m.m.}$  a  $B^{11}$  2,14 MeV-es gerjesztett állapotának a vektor-polarizációja. (Mivel spinje  $\frac{1}{2}$ , azért más polarizáció nem léphet fel.) Az  $f_1$  megadásához szükséges lenne ismernünk a  $\gamma$  átmenet multipolaritását. Az impulzusmomentum és paritásmegmaradás miatt M1 és E2 átmenet jöhet szóba. Mivel azonban mind a  $(p, \gamma)$  szögkorreláció, mind pedig a magasabb nívókról jövő  $\gamma$  sugárzással végzett  $(\gamma, \gamma)$  szögkorreláció izotróp a közbülső nívó  $b = \frac{1}{2}$  spinje miatt, ezért ezekből a mérésekből az M1 és E2 sugárzás keveredését nem lehetett megállapítani. A  $(\gamma, \gamma)$  szórásból meghatározott  $\tau_{2,14} = (4,6 \pm 0,6) \cdot 10^{-15}$  sec felezési ideje ennek a nívónak jó összhangban van az ez esetre közbülső csatolással M1 átmenetre számított  $\tau_{2,14 \text{ elm}} = (2,5 \sim 5,0) \cdot 10^{-15}$  sec felezési idővel [22]. Így az átmenetet tiszta M1 átmenetnek vehetjük. Ebben az esetben

$$f_1\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) = + \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

hogy az az energiának elég erősen változó függvénye (de nem hasonlítható a közbülső magon keresztül végbemenő reakciók szögeloszlásához!). Így, leginkább arra kell következtetnünk, hogy e reakció több mechanizmussal mehet végbe. Az egyes mechanizmusok energiatartományban egymástól eltérő, és így a különböző bombázó energiatartományban más és más reakciómechanizmus válik dominánssá. Mindezek a tiltott mechanizmusok csak azért éreztethetik egyáltalán hatásukat, mert a megengedett mechanizmussal ez a folyamat nem mehet végbe.

A fentiekből kitűnik, hogy igen hasznos minden infor-



Ezzel az  $f_1(\frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ -del és a mért  $P_{\gamma c. p.}$  értékkel a maradék mag polarizációja:

$$P_{m. m} = +0,86 \pm 0,52$$

Ha a protonpolarizációra is további következtetéseket akarunk levonni, azt csak további feltevések mellett tehetjük. Az elméleti részben levezetett összefüggések ugyanis csak a megengedett stripping reakciókra vonatkoznak. A fentiekből viszont láttuk, hogy e reakció értelmezésére több mechanizmust feltételeznek. Így feltehetjük azt is, hogy e reakció bizonyos energián esetleg megengedett stripping mechanizmussal,  $l_n = 3$ -mal megy végbe. Erre az esetre alkalmazhatjuk 62. képletünket. Ezek szerint

$$\frac{P_{m. m.}}{P_p} = (-1)^{\frac{1}{2} - 3 + \frac{1}{2} + 3} \left[ \frac{\frac{3}{2} \cdot 2 \cdot 3 \cdot 7}{\frac{1}{2} \cdot 4} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{j_n j'_n} \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n \frac{1}{2} j'_n \frac{1}{2}; 31) W(j_n 3 j'_n 3; \frac{1}{2} 1) \cdot$$

$$\cdot \frac{\theta_{j_n} \theta_{j'_n}}{\frac{3}{4} \theta_+^2 + \theta_-^2} = \{2,89 \theta_+^2 - 2,14 \theta_-^2 + 1,48 \theta_+ \theta_-\} \frac{1}{0,75 \theta_+^2 - \theta_-^2},$$

ahol  $\theta_+ \equiv \theta_{j_n = \frac{7}{2}, l_n = 3}$ ,  $\theta_- \equiv \theta_{j_n = \frac{5}{2}, l_n = 3}$ . Látszik ebből az összefüggésből, hogyha elfogadjuk azt a feltevést, hogy ezen az energián ez a reakció megengedett stripping mechanizmussal megy végbe, akkor a protonpolarizáció mérésével és a mért  $\gamma$  cirkuláris polarizáció segítségével a  $\theta_+/\theta_-$  hányados meghatározható. Amennyiben ezt a hányadost más úton (pl. magmodell számításokkal) meg lehet határozni, úgy fenti összefüggésünk teljesülése vagy nem teljesülése éppen arra ad felvilágosítást, hogy a reakció megengedett mechanizmussal megy-e végbe vagy sem.

## 2. A $B^{10}(d, p)B_{4,46}^{11*}(\gamma)B_0^{11}$ reakció.

A második gerjesztett nívóra vezető protonok szögeloszlásának méréséből megállapítható, hogy e reakció  $l_n = 1$ -gyel, megengedett stripping mechanizmussal megy végbe. Így a  $P_{\gamma c. p.}$  67-ben felírt kifejezésében az összegező  $k$  index csak a 0, 1, 2 értékeket veheti fel. Ez azt jelenti, hogy a számlálóban csak a  $k = 1$ -es tag, a nevezőben a  $k = 0$  és  $k = 2$ -es tag marad meg. Az e nívón keresztülmenő  $(d, p\gamma)$  szöghkorreláció mérés szerint ez a korreláció 5%-on belül izotróp [23]. A 65 és 67 képletek összehasonlításából kiderül, hogy a  $P_{\gamma c. p.}$  nevezőjében levő kifejezés lényegében azonos a  $(d, p\gamma)$  szöghkorreláció kifejezésével. Ebből következik, hogyha a  $(d, p\gamma)$  iránykorrelációban az anizotrópiáért felelős  $k = 2$ -es tag elhanyagolható a  $k = 0$ -ás tag mellett, akkor a  $P_{\gamma c. p.}$  nevezőjében is elhagyható a  $k = 2$ -es tag. Ezek szerint tehát a jelen esetben 67-ből a következő összefüggést írhatjuk fel ( $a = 3$ ,  $b = \frac{5}{2}$ ,  $c = \frac{3}{2}$ ,  $l_n = l'_n = 1$ ,  $j_n, j'_n = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ ):

$$P_{\gamma c. p.} = \frac{\sum_{j_n j'_n} \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n 1 j'_n 1; \frac{1}{2} 1) W(j_n \frac{5}{2} j'_n \frac{5}{2}; 31) \theta_{j_n} \theta_{j'_n}}{\sum_{j_n j'_n} \hat{j}_n \hat{j}'_n W(j_n 1 j'_n 1; \frac{1}{2} 0) W(j_n \frac{5}{2} j'_n \frac{5}{2}; 30) \theta_{j_n} \theta_{j'_n}} \frac{\tilde{q}_{10}(11)}{\tilde{q}_{00}(11)} \frac{f_1(\frac{3}{2} \frac{5}{2})}{f_0(\frac{3}{2} \frac{5}{2})} =$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\theta_-^2 - 1,79 \theta_+ \theta_- - 0,100 \theta_+^2}{\theta_-^2 + \theta_+^2} \cdot \frac{1 + 0,524 \delta^2 - 1,01 \delta}{1 + \delta^2} \cdot \tilde{P}_{l_n},$$

ahol  $\theta_- \equiv \theta_{j_n=\frac{1}{2}, l_n=1}$ ,  $\theta_+ \equiv \theta_{j_n=\frac{3}{2}, l_n=1}$ ;  $\delta$  az E2 és M1 multipolaritású  $\gamma$  átmenet redukált átmeneti mátrixelemeinek hányadosa:  $\delta = \langle \frac{3}{2} \| E2 \| \frac{5}{2} \rangle / \langle \frac{3}{2} \| M1 \| \frac{5}{2} \rangle$ ;  $\delta^2$  a két átmenet intenzitásának a hányadosa. Más mérésekből ismeretes, hogy  $\delta = 0,14 \pm \pm 0,01$  [24]. Ezzel az értékkel a  $P_{\gamma c. p.}$  kifejezése:

$$P_{\gamma c. p.} = -0,426 \frac{x^2 - 1,79x - 0,100}{x^2 + 1} P_{l_n},$$

ahol  $x = \theta_- / \theta_+$ . A  $\delta$  hibájából ide átszármazó hibát is felírva  $-0,426 \pm 0,005$ -öt kapnánk szorzófaktorként. Ezt az 1%-os hibát elhanyagolhatjuk a mért  $P_{\gamma c. p.}$  hibájához képest. A protonpolarizáció az 50. képlet szerint:

$$P_p = -\frac{1}{3} \frac{x^2 - 0,500}{x^2 + 1} P_{l_n}.$$

E két kifejezésből a  $\gamma$  cirkuláris polarizáció és a protonpolarizáció viszonya:

$$P_{\gamma c. p.} = 1,278 \frac{x^2 - 1,79x - 0,100}{x^2 - 0,500} P_p.$$

Megint látjuk, hogy a két polarizáció hányados még függ  $x$  értékétől. Így a további következtetések levonásához szükség van  $x$  meghatározására. Ezt elvben a  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció méréseiből megtehetjük. Sajnos azonban az eddig elvégzett mérések nem kielégítő pontosságúak. Az elvégzett mérésekből csak azt tudjuk, hogy az iránykorreláció 5%-on belül izotróp. A továbbiakban, míg pontosabb mérési adat nem áll rendelkezésünkre, tegyük fel, hogy az iránykorreláció teljesen izotróp. Ehhez szükséges, hogy  $W(\theta_\gamma, \varphi_\gamma)$  65 kifejezésében az  $Y_{2\lambda}(\theta_\gamma, \varphi_\gamma)$  együtthatója eltűnjön:

$$\sum_{j_n j_n'} \hat{j}_n \hat{j}_n' W(j_n 1 j_n' 1; \frac{1}{2} 2) W(j_n \frac{5}{2} j_n' \frac{5}{2}; 32) \theta_{j_n} \theta_{j_n'} = 0.$$

Ebből az egyenletből meghatározva  $x = \theta_- / \theta_+$ -t,  $x = \infty$  és  $x = -0,61$ -et kapunk. Ezeket az  $x$  értékeket, valamint a  $P_{\gamma c. p.}$  mért értékét helyettesítve a fent felírt összefüggésekbe, a következő kifejezéseket nyerjük:

$$P_{l_n} = -0,52 \pm 0,18, \text{ ugyanaz } x \text{ mindkét értékére;}$$

$$P_p = \begin{cases} +0,17 \pm 0,06, & \text{ha } x = \infty \quad (\theta_+ = 0) \\ -0,016 \pm 0,0056, & \text{ha } x = -0,61. \end{cases}$$

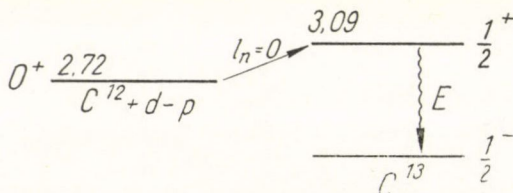
A polarizáció előjelét itt is, mint a többi méréseknél is, a baseli konvenció szerint, tehát a  $\mathbf{k}_d \times \mathbf{k}_p$  irányra vonatkoztatva adtuk meg. Az itt megadott  $P_{l_n}$  és  $P_p$  értékek akkor fogadhatók el véglegesen, ha a további  $(d, p\gamma)$  iránykorreláció-mérések jóval kisebb hibahatáron belül is izotrópnak találják a korrelációt. (Természetesen, ha nem izotróp iránykorrelációt fognak mutatni a későbbi mérések, akkor is meg lehet határozni  $x$  értékét, és abból  $P_{l_n}$  és  $P_p$  értékeit a fenti összefüggésekből.) A stripping reakciók CFDWBA modelljének próbáját viszont akkor kajuk meg, ha a protonpolarizációt is megmérjük, s a mért értékeket összehasonlítjuk az itt felírt értékekkel. A két úton meghatározott protonpolarizáció egyezése vagy nem egyezése mutatja éppen a CFDWBA modell feltevéseinek a jogosult vagy jogosulatlan voltát.



### 3. A $C^{12}(d, p)C_{3,09}^{13*}(\gamma)C_0^{13}$ reakció.

A  $C^{13}$  első, 3,09 MeV gerjesztési energiájú, nívójára vezető stripping reakcióban a neutron  $l_n=0$  pályaimpulzusmomentummal fogódik be a targetmagba. A  $C^{13}$  első gerjesztett állapotának spinje és paritása  $\frac{1}{2}^+$  (l. 15. ábra). Ebből az állapotból az  $\frac{1}{2}^-$  spinű és paritású alapállapotba csak E1 sugárzással mehet át a mag az impulzusmomentum és paritásválasztási szabályok miatt.

Mivel  $l_n=0$  esetén az  $l_n$  pályaimpulzusmomentumvektornak polarizációja természetesen nem lehet, ezért  $P_{l_n}=0$ . Így a CFDWBA szerint sem az ilyen reakcióból származó protonok nem lehetnek polarizáltak sem az ezt a reakciót követő



15. ábra. Részlet a  $C^{13}$  mag nívószerkezetének vázlatából

$\gamma$ -sugárzás nem lehet církulárisan polárizott, hiszen mindkettőben szorzófaktor-ként szerepel  $P_{l_n}$ . (A  $P_{\gamma c.p.}$  kifejezésében a  $\rho_{k\lambda}(l_n l'_n)$  magasabb rendű statisztikus tenzorok is szerepelnek. Természetesen  $l_n=0$  esetén ezek is mind nullák.)

Az elvégzett protonpolarizáció mérések szerint azonban mégis ezeknél a protonoknál is találtak polarizációt. Hansel és Parkinson mérései szerint  $\theta_{\text{töml.közp.}} = 50^\circ$ -nál  $E_d = 7,8$  MeV esetén  $P_p = +0,21 \pm 0,04$  [25]. Ezt a polarizációt a feltevések szerint a disztortáló potenciálnak a  $\sigma$ -t tartalmazó tagja adja, melyet a CFDWBA modell alapfeltevései szerint elhanyagolhatónak vettünk. Sajnos azonban, ha a spin-pálya kölcsönhatást is figyelembe vesszük, nem írhatunk fel egyszerű összefüggéseket a protonpolarizáció és a  $\gamma$  církuláris polarizáció között. Így ebben az esetben csak az marad hátra, hogy mind a protonpolarizációt, mind pedig a  $\gamma$  církuláris polarizációt külön-külön kiszámoljuk számítógéppel, s az így kapott eredményeket hasonlítjuk össze. Ekkor ezen eredmények összehasonlítása a tapasztalattal szolgáltatja a kontrollt, hogy a még ekkor is megtartott elhanyagolások mennyiben jogosultak. Ilyen gépi számítások igen bonyolultak, s csak nagy teljesítményű számítógépen végezhetők el. A protonpolarizáció számítását erre a reakcióra  $E_d = 6,0$  MeV-re Johnson elvégezte [26]. A  $\gamma$  církuláris polarizáció számítása azonban újabb hosszabb gépi számítást igényel. Így jelenleg ezen számítások elvégzéséig, a mért  $P_{\gamma c.p.}$  értékből további következtetéseket nem vonhatunk le.

#### I. Függelék. A sűrűség és érzékenységi mátrixok és tenzorok

A szög és polarizáció-korrelációk számítására a legcélszerűbbnek bizonyult a sűrűség és érzékenységi mátrixok és tenzorok [6] használata. A kvantummechanikailag leírandó rendszer tartalmazza  $p(a\alpha A)$  valószínűséggel az  $|a\alpha A\rangle$  Dirac-félekett vektorral megadott állapotot. Itt  $a$  és  $\alpha$  a rendszer impulzusmomentumát és mágneses kvantumszámát,  $A$  pedig egyéb kvantumszámait jelenti. Ekkor a sűrűségoperátor definíciója:

$$\rho = \sum_{a\alpha A} |a\alpha A\rangle p(a\alpha A) \langle a\alpha A|. \quad (\text{F1})$$

Ezen operátor mátrixelemeit képezhetjük valamely  $|b\beta, B\rangle$  bázisrendszer segítségével,

s így kapjuk a sűrűség-mátrixot:

$$\langle b\beta, B | \varrho | b'\beta', B' \rangle.$$

E sűrűségmátrix a koordinátarendszer elforgatásakor reducibilis módon transzformálódik. Ezért célszerű áttérni a sűrűségmátrixról az irreducibilis módon transzformálódó sűrűségtenzorra:

$$\varrho_{k\kappa}(bB, b'B') = \sum_{\beta\beta'} (-1)^{b'-\beta'} (b\beta, b' - \beta' | k\kappa) \langle b\beta, B | \varrho | b'\beta', B' \rangle. \quad (\text{F2})$$

Az így definiált sűrűségtenzor a koordinátarendszer elforgatásakor a következő módon transzformálódik:

$$\varrho'_{k\kappa}(bB, b'B') = \sum_{\kappa'} \varrho_{k\kappa'}(bB, b'B') D_{\kappa, \kappa'}^k(\mathfrak{R}), \quad (\text{F3})$$

ahol  $D_{\kappa, \kappa'}^k(\mathfrak{R})$  a forgástranszformáció uniter mátrixa, a forgáscsoport  $k$ -ad rendű irreducibilis ábrázolása;  $\mathfrak{R}$  azt az elforgatást jelenti, mely azt a koordinátarendszert, melyben  $\varrho'_{k\kappa}$ -t keressük, átviszi abba a koordinátarendszerbe, melyben  $\varrho_{k\kappa}$  adott.

Mérőberendezésünket is hasonló módon írhatjuk le. Jelöljük  $e(c\gamma, C)$ -vel azt a valószínűséget, mely valószínűséggel berendezésünk a  $|c\gamma, C\rangle$  ket-tel leírt állapotot detektálja. Ekkor az érzékenységi operátor definíciója:

$$\varepsilon = \sum_{c\gamma C} |c\gamma, C\rangle e(c\gamma, C) \langle c\gamma, C|. \quad (\text{F4})$$

A fentebb leírt okból és módon képezzük az érzékenységi mátrixot

$$\langle b\beta, B | \varepsilon | b'\beta', B' \rangle,$$

és az érzékenységi tenzort

$$\varepsilon_{k\kappa}(bB, b'B') = \sum_{\beta\beta'} (-1)^{b'-\beta'} (b\beta, b' - \beta' | k\kappa) \langle b\beta, B | \varepsilon | b'\beta', B' \rangle. \quad (\text{F5})$$

Ha a  $\varrho_{k\kappa}(bB, b'B')$  sűrűségi tenzorokkal leírt rendszeren az  $\varepsilon_{k\kappa}(bB, b'B')$  érzékenységi tenzorokkal leírt mérőberendezéssel mérést hajtunk végre, a mérés várható eredménye:

$$W = \sum_{\substack{k\kappa \\ bb', BB'}} \varrho_{k\kappa}(bB, b'B') \varepsilon_{k\kappa}^*(bB, b'B'). \quad (\text{F6})$$

E kifejezés helyességét egyszerűen ellenőrizhetjük. Helyettesítsük be ide  $\varrho_{k\kappa}$  és  $\varepsilon_{k\kappa}$  F 2 és F 5-ben felírt definícióit. Ekkor, a Clebsch—Gordan együtthatók orthonormalitását figyelembe véve  $W$  a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} W &= \sum_{\substack{k\kappa \\ bb', BB'}} \varrho_{k\kappa}(bB, b'B') \varepsilon_{k\kappa}^*(bB, b'B') = \\ &= \sum_{\substack{\alpha\alpha A \\ c\gamma C}} |\langle \alpha\alpha, A | c\gamma, C \rangle|^2 p(\alpha\alpha A) e(c\gamma, C). \end{aligned}$$

E formula jelentése: a mérendő rendszer  $p(\alpha\alpha, A)$  valószínűséggel tartalmazza a  $|\alpha\alpha, A\rangle$  állapotot. Ezen állapot  $|\langle \alpha\alpha, A | c\gamma, c \rangle|^2$  valószínűséggel tartalmazza a  $|c\gamma, C\rangle$  állapotot. A  $|c\gamma, C\rangle$  állapotot a mérőberendezés  $e(c\gamma, C)$  valószínűséggel detektálja. A mérőberendezés megszólalásának valószínűsége nyilván e három valószínűségből képezett szorzatok összege. Így tehát a számításokhoz célszerű alakban felírt F 6 képletünk helyességét is igazoltuk.



## II. Függelék. A $\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, a\alpha \rangle$ mátrixelem kiszámítása

A reakció-mátrixelem kiszámítását oly módon fogjuk végezni, hogy megoldjuk a probléma Schrödinger-egyenletét azzal a határfeltétellel, hogy a hullámfüggvény a bemenő csatornában tartalmazza beeső síkhullámokat és szóró hullámokat, a többi csatornában pedig csak kimenő szóró hullámokat. E hullámfüggvényünket sorbafejtjük a reakció-csatornák szerint. Ekkor az egyes csatornafüggvények együtthatói éppen a bemenő csatornából az illető reakciócsatornába vezető reakciók  $R$  mátrixelemei.

Írjuk fel tehát a Schrödinger-egyenletet:

$$H\Psi_{r,i}^{(+)} = E\Psi_{r,i}^{(+)} \quad (\text{F7})$$

Itt  $r$  a csatorna-index, amely tehát megadja, hogy milyen részecskepár van a csatornában és mennyi ezek energiája,  $i$  pedig az egyéb kvantumszámokat jelentse az adott csatornán belül (spin, mágneses kvantumszámok). A  $H$  Hamilton operátort felbonthatjuk egy  $s$  kimenő csatornában levő részecskék  $H_s$  belső Hamilton-operátorának, valamint a részecskepár között ható  $V_s$  kölcsönhatásnak és a részecskék relatív mozgási energiáját leíró  $T_s$  kinetikus energiaoperátornak összegére:

$$H = H_s + V_s + T_s \quad (\text{F8})$$

A  $\Psi_{r,i}^{(+)}$ -ben az  $r, i$  index arra utal, hogy  $\Psi_{r,i}^{(+)}$  az  $r$ -edik csatornában tartalmaz beeső síkhullámot, és a csatornában a részecskepár spin mágneses kvantumszámait jellemzi az  $i$  index.  $\Psi_{r,i}^{(+)}$ -t sorbafejtjük a  $\Phi_{sj}$  csatornafüggvények szerint:

$$\Psi_{r,i}^{(+)} f = \sum_{s,j} \Phi_{sj} \langle \Phi_{sj} | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle \equiv \sum_{s,j} \Phi_{sj} \varphi_{sj}(\vec{r}_s) \quad (\text{F9})$$

Itt  $\Phi_{sj}$  definíciója szerint eleget tesz a

$$H_s \Phi_{sj} = E_s \Phi_{sj} \quad (\text{F10})$$

Schrödinger egyenletnek. Mivel  $\langle \Phi_{sj} | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle$ -ben kiintegráltunk  $\vec{r}_s$ -en kívül az összes többi változóra, ezért jogos a kifejezés  $\varphi_{sj}(\vec{r}_s)$ -sel való jelölése;  $\vec{r}_s$  éppen az  $s$ -edik csatornában levő részecskepár relatív koordinátája. A továbbiakban  $\varphi_{sj}(\vec{r}_s)$ -t kell meghatároznunk.

Helyettesítsük  $\Psi_{r,i}^{(+)}$  F9-ben megadott sorfejtett alakját az F7 Schrödinger-egyenletbe és használjuk a Hamilton operátornak F8-beli felbontását:

$$H\Psi_{r,i}^{(+)} = (H_s + T_s + V_s) \sum_{s',j'} \Phi_{s'j'} \varphi_{s'j'}(\vec{r}_{s'}) = E\Psi_{r,i}^{(+)}.$$

Szorozzuk ezen egyenletet balról  $\Phi_{sj}^+$ -tal, és integráljunk az összes belső koordinátára:

$$\sum_{s',j'} \{E_s \delta_{sj, s'j'} + T_s \delta_{sj, s'j'} + \langle \Phi_{sj} | V_s | \Phi_{s'j'} \rangle\} \varphi_{s'j'}(\vec{r}_s) = E \langle \Phi_{sj} | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle = E \varphi_{sj}(\vec{r}_s).$$

Ezt az egyenletet átrendezve kapjuk a következő alakot:

$$\{\varepsilon_s - T_s\} \varphi_{sj}(\vec{r}_s) = \sum_{s',j'} \langle \Phi_{sj} | V_s | \Phi_{s'j'} \rangle \varphi_{s'j'}(\vec{r}_s) \quad (\text{F11})$$

Most vezessük be a  $\bar{V}_s(r_s)$  átlagpotenciált a következő azonos átalakítással:

$$V_s = \bar{V}_s(r_s) + v, \quad (\text{F } 12)$$

ahol  $v_s$  az összes maradék kölcsönhatás, amit  $\bar{V}_s(r_s)$ -sal nem vettünk figyelembe. A későbbiek során  $\bar{V}_s(r_s)$  helyébe az optikai potenciál és a Coulomb-potenciál összegét fogjuk helyettesíteni. Mivel  $\bar{V}_s(r_s)$  csak  $r_s$ -től függ, és nem hat  $\Phi_{sj}$  koordinátáira, ezért  $\langle \Phi_{sj} | \bar{V}_s | \Phi_{s'j'} \rangle = \bar{V}_s(r_s) \delta_{sj, s'j'}$ . Tegyük most fel, hogy  $v_s$  nem tartalmaz sem spin-pálya, sem spin-spin kölcsönhatási tagot a kirepülő részecskére (ez a centrális erő közelítés). Ekkor  $\langle \Phi_{sj} | V_s | \Phi_{s'j'} \rangle$  nem függ  $j$ -től és így  $\varphi_{sj}(v_s)$  sem függ  $j$ -től. Ezért a továbbiakban a  $j$  indexet el is hagyjuk. A mondottak figyelembevételével F 11-et így írhatjuk:

$$\{\varepsilon_s - T_s - \bar{V}_s(r_s)\} \varphi_s(\vec{r}_s) = \langle \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle. \quad (\text{F } 13)$$

Itt a jobb oldalt F 9 felhasználásával írtuk megint tömörebb alakba. F 13 a megoldandó differenciálegyenlet. A  $\varphi_s(\vec{r}_s)$ -re vonatkozó asszimptotikus határfeltétel:  $s=r$  esetén síkhullám + szórt hullám alakú,  $s \neq r$  esetén csak kifutó szórt hullám alakú legyen  $r_s \rightarrow \infty$  esetén. A megoldást a Green-függvények segítségével írjuk fel. Az inhomogén differenciálegyenlet egy partikuláris megoldása:

$$\int g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s) \langle \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle d\vec{r}'_s,$$

ahol a  $g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s)$  Green-függvény az

$$\{\varepsilon_s - T_s - \bar{V}_s(r_s)\} g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s) = \delta(\vec{r}_s - \vec{r}'_s) \quad (\text{F } 14)$$

differenciálegyenlet megoldása. A fenti partikuláris megoldáshoz még hozzá kell adnunk a homogén egyenletnek egy olyan megoldását, melynek segítségével határfeltételeink kielégíthetőek lesznek. Jelöljük ezt a megoldást  $\varphi_s^{(+)}(\vec{r}_s, \mathbf{k}_s)$ -sel. A rávonatkozó differenciálegyenlet:

$$\{\varepsilon_s - T_s - \bar{V}_s(r_s)\} \varphi_s^{(+)}(\vec{r}_s, \mathbf{k}_s) = 0, \quad (\text{F } 15)$$

ahol

$$\frac{\hbar^2}{2M_s^*} k_s^2 = \varepsilon_s$$

az  $s$  csatornában levő részecsepár relatív kinetikus energiája.  $M_s^*$  az  $s$  csatorna-beli redukált tömeg. A  $\varphi_s^{(+)}(\vec{r}_s, \mathbf{k}_s)$ -re vonatkozó asszimptotikus határfeltétel:

$$\varphi_s^{(+)}(\mathbf{r}_s, \mathbf{k}_s) = e^{i\mathbf{k}_s \vec{r}_s} + \text{szórt hullám}. \quad (\text{F } 16)$$

Mivel a  $\Psi_{r,i}^{(+)}$ -re kirótt határfeltétel szerint síkhullám csak a bemenő csatornában lehet, ezért végülis a  $\varphi_s(\vec{r}_s)$  megoldást így írhatjuk fel:

$$\varphi_s(\vec{r}_s) = \delta_{r,s} \varphi_r^{(+)}(\vec{r}_s, \mathbf{k}_r) + \int g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s) \langle \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle d\vec{r}'_s. \quad (\text{F } 17)$$

Hátra van még  $\varphi^{(+)}(\vec{r}, \mathbf{k})$  és  $g(\vec{r}, \vec{r}')$  meghatározása.  $\varphi^{(+)}$ -t parciális hullámok szerint sorfejtett alakban keressük:

$$\varphi_s^{(+)}(\vec{r}_s, \mathbf{k}_s) = \frac{4\pi}{k_s r_s} \sum_{l,m} i^l e^{i\sigma_l} f_l(k_s r_s) Y_{lm}(\vec{r}_s) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}_s). \quad (\text{F } 18)$$



$\varphi_s^{(+)}$ -nak ezt az alakját az F 15 egyenletbe helyettesítve az  $f_l(k_s r_s)$  radiális függvényre a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr_s^2} + \frac{l(l+1)}{r_s^2} + \frac{2M_s^*}{\hbar^2} \bar{V}_s(r_s) - k_s^2 \right\} f_l(k_s r_s) = 0. \quad (\text{F19})$$

Mivel  $\bar{V}_s(r_s)$  a gyors lecsengésű optikai potenciál és Coulomb potenciál összege, ezért

$$f_l(\varrho) \xrightarrow[\varrho \rightarrow \infty]{} \frac{i}{2} \{H_l^*(\varrho) - \eta_l H_l(\varrho)\}, \quad (\text{F20})$$

ahol

$$H_l(\varrho) = G_l(\varrho) + iF_l(\varrho),$$

$F_l(\varrho)$  és  $G_l(\varrho)$  pedig a reguláris és irreguláris Coulomb függvények [8]. E függvények aszimptotikus alakjai:

$$F_l(\varrho) \xrightarrow[\varrho \rightarrow \infty]{} \sin \theta_l,$$

$$G_l(\varrho) \xrightarrow[\varrho \rightarrow \infty]{} \cos \theta_l,$$

$$\theta_l = \varrho - n \ln 2\varrho - \frac{l\pi}{2} + \sigma_l, \quad (\text{F21})$$

$$\sigma_l = \arg \Gamma(l+1+in),$$

$$n = ZZ' M^* \frac{e^2}{\hbar k},$$

ahol  $Z$  és  $Z'$  a részecskepár töltései,  $M^*$  redukált tömegük,  $k$  a relatív mozgásuk hullámszáma.

Behelyettesítéssel igazolható, hogy Green függvényünk a következő:

$$g(r_s, \vec{r}_s') = \frac{2M_s^*}{\hbar^2} \sum_{l,m} \frac{1}{k_s r_s r_s'} f_l(k_s r_{s<}) h_l(k_s r_{s>}) Y_{lm}(\hat{r}_s) Y_{lm}^*(\hat{r}_s'), \quad (\text{F22})$$

ahol  $r_{s<}$  ill.  $r_{s>}$  az  $r_s$  és  $r_s'$  közül a kisebbiket ill. a nagyobbikat jelenti,  $f_l(\varrho)$  az előbb tárgyalt radiális függvény,  $h_l(\varrho)$  pedig ugyanannak a differenciálegyenletnek (F 19) eleget tevő,  $a \varrho=0$  helyen irreguláris függvény. Aszimptotikus alakja:

$$h_l(\varrho) \xrightarrow[\varrho \rightarrow \infty]{} H_l(\varrho). \quad (\text{F23})$$

Mivel mi  $\Psi_{r,i}^{(+)}$  aszimptotikus alakját keressük  $r_s \rightarrow \infty$ -re, az F 17-ben pedig az integrandus csak kis  $r_s'$  értékekre ad lényeges járulékot az integrálhoz, ezért F 17-ben használhatjuk  $g(\vec{r}_s, \vec{r}_s')$  aszimptotikus,  $r_s \rightarrow \infty$ ,  $r_s' < r_s$ -re vonatkozó alakját:

$$\begin{aligned} g(\vec{r}_s, \vec{r}_s') &\xrightarrow[r_s \rightarrow \infty]{} \frac{2M_s^*}{\hbar^2} \frac{e^{ik_s r_s}}{r_s} \frac{1}{k_s r_s'} \sum_{lm} i^{-l} e^{i\sigma_l} f_l(k_s r_s') Y_{lm}(\hat{r}_s) Y_{lm}^*(\hat{r}_s') = \\ &= \frac{2M_s^*}{\hbar^2} \frac{e^{ik_s r_s}}{4\pi r_s} \cdot \frac{4\pi}{k_s r_s'} \sum_{lm} i^l e^{i\sigma_l} f_l(k_s r_s') Y_{lm}^*(-\hat{r}_s) Y_{lm}(\hat{r}_s'). \end{aligned}$$

$g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s)$ -nak ezt az alakját összevetve  $\varphi_s^{(+)}(\vec{r}_s, \mathbf{k}_s)$  F 18-beli alakjával, rögtön szembe-tűnik, hogyha úgy definiálunk egy  $\mathbf{k}_s$  vektort, hogy

$$\mathbf{k}_s = k_s \frac{\vec{r}_s}{r_s} \quad \text{legyen,}$$

akkor Green-függvényünket a következő alakban írhatjuk:

$$g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s) = \frac{M_s^*}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_s r_s}}{r_s} \varphi_s^{(+)}(-\mathbf{k}_s, \vec{r}_s), \quad \text{ha } r_s \rightarrow \infty.$$

Bevezetve  $\varphi_s^{(+)}(-\mathbf{k}_s, \vec{r}_s)$  időtükrözöttjét a Wigner-reláció segítségével:

$$\varphi_s^{(-)*}(\mathbf{k}_s, \vec{r}_s) = \varphi_s^{(+)}(-\mathbf{k}_s, \vec{r}_s), \quad (\text{F24})$$

Green függvényünket a következő alakban írhatjuk:

$$g(\vec{r}_s, \vec{r}'_s) = \frac{M_s^*}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_s r_s}}{r_s} \varphi_s^{(-)*}(\mathbf{k}_s, \vec{r}_s). \quad (\text{F25})$$

$g(r_s, r'_s)$ -nek ezt az alakját F 17-be helyettesítve, s az így kapott  $\varphi_s(\vec{r}_s)$ -t F 9-be írva  $\Psi_{r,i}^{(+)}$ -re a következő kifejezést kapjuk:

$$\Psi_{r,i}^{(+)} = \Phi_{r,i} \varphi_r^{(+)}(\mathbf{k}_r, \vec{r}_r) + \frac{M_s^*}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_s r_s}}{r_s} \Phi_{sj} \langle \varphi_s^{(-)}(\mathbf{k}_s) \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle + \quad (\text{F26})$$

+ egyéb csatornák és egyéb  $j$ -k járuléka. Itt

$$\langle \varphi_s^{(-)}(\mathbf{k}_s) \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle \equiv \int \varphi_s^{(-)*}(\mathbf{k}_s, \vec{r}_s) \langle \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle d\vec{r}_s.$$

Vegyük most észre, hogy  $\Phi_{sj} \frac{e^{ik_s r_s}}{r_s}$  éppen az  $s$ -edik csatornához tartozó teljes csatornafüggvény, és így  $\Psi_{r,i}^{(+)}$  F 26-beli sorfejtésében  $\Phi_{sj} \frac{e^{ik_s r_s}}{r_s}$  együtthatója éppen a reakciómátrixelem:

$$\langle s, \mathbf{k}_s, j | R | r, \mathbf{k}_r, i \rangle.$$

Így tehát leolvashatjuk a keresett összefüggést:

$$\langle s, k_s, j | R | r, \mathbf{k}_r, i \rangle = \langle \varphi_s^{(-)}(\mathbf{k}_s) \Phi_{sj} | v_s | \Psi_{r,i}^{(+)} \rangle, \quad \text{ha } r \neq s. \quad (\text{F 27})$$

Ez az összefüggés a Gell—Mann, Goldberger-reláció a nem diagonális mátrixelemekre. Ez eddig exakt. (Mi a levezetés során ugyan felhasználtuk azt a közelítést, hogy a spinpálya kölcsönhatás elhanyagolható, de ez nem lényeges az eddigiekben. Ha ezt az elhanyagolást nem tesszük,  $\varphi_s^{(-)}$  még függni fog  $j$ -től is. Ezt a függést hozzá kell írunk, és akkor teljesen exakt lesz az F 27 egyenlet).

A torzított hullámú közelítés mármost abban áll, hogy  $\Psi_{r,i}^{(+)}$  helyett  $\Phi_{r,i} \varphi_r^{(+)}$ -t írunk. Ez azt jelenti, hogy az elasztikus folyamatot tekintjük a domináns folyamatnak, és ehhez képest a tárgyalt reakciót perturbációként kezeljük. Mindazonáltal, mivel a  $\varphi_r^{(+)}$ -t meghatározó egyenletbe az optikai potenciált is beírtuk, ezért ebben



a közelítésben a közbülső magképződés átlagos hatását is figyelembe vettük. A mondtak szerint a torzított hullámú közelítésben a reakció-mátrixelem:

$$\langle s, \mathbf{k}_s, j | R | r, \mathbf{k}_r, i \rangle = \langle \varphi_s^{(-)}(\mathbf{k}_s) \Phi_{sj} | v_s | \Phi_{ri} \varphi_r^{(+)}(\mathbf{k}_r) \rangle. \quad (\text{F28})$$

Ezek után írjuk át F 28-ban felírt általános összefüggésünket a minket érdeklő  $(d, p)$  stripping reakció esetére. A megfeleltetések a következők:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_r &= \mathbf{k}_d & \mathbf{k}_s &= \mathbf{k}_p \\ i &= \alpha, \mu_d & j &= \beta, \mu_p \\ \Phi_{ri} &= \psi_{\alpha}(\xi) \psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \chi_{\mu_d}(\sigma_n \sigma_p) & \Phi_{sj} &= \psi_{\beta}(\xi, \vec{r}_n \sigma_n) \chi_{\mu_p}(\sigma_p) \\ \varphi_r^{(+)} &= \varphi_d^{(+)}(\mathbf{k}_d, \vec{r}_d) & \varphi_s^{(-)} &= \varphi_p^{(-)}(\mathbf{k}_p, \vec{r}_p') \\ \vec{r}_r &= \vec{r}_d = \frac{\vec{r}_n + \vec{r}_p}{2} & \vec{r}_s &= \vec{r}_p' = \vec{r}_p - \frac{M_n}{M_B} \vec{r}_n. \end{aligned}$$

Itt  $\mathbf{k}_d$  a bombázó deuteron hullámvektora,  $\mu_d$  a spin vetülete;  $\psi_{\alpha}(\xi)$  az  $\alpha$  spinű,  $\alpha$  spinvetületű targetmag hullámfüggvénye,  $\xi$  annak első koordinátái;  $\psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p)$  a deuteron első mozgásának hullámfüggvénye;  $\chi_{\mu_d}(\sigma_n, \sigma_p)$  a deuteron spinfüggvénye,  $\sigma_n$  és  $\sigma_p$  pedig a spin koordináták;  $\mathbf{k}_p$  a távozó proton hullámvektora,  $\psi_{\beta}(\xi, \vec{r}_n \sigma_n)$  a neutron befogásával keletkezett  $b$  spinű,  $\beta$  spinvetületű maradék mag hullámfüggvénye,  $\chi_{\mu_p}(\sigma_p)$  a proton spinfüggvénye;  $\vec{r}_p'$  a kirepülő proton helyvektora a maradék mag tömegközéppontjától mérve. A  $V_s$  kölcsönhatás a proton kölcsönhatása az összes többi nukleonnal:

$$V_s = V_{pB} = V_{pA}(\xi, \vec{r}_p' \sigma_p) + V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p', \sigma_n, \sigma_p),$$

ahol  $V_{pB}$  a proton és a  $B$  maradék mag,  $V_{pA}$  a proton és a targetmagot alkotó nukleonok kölcsönhatása, mely nukleonok azonban már a  $B$  magbéli állapotban vannak;  $V_{np}$  a kötött neutron és a szabad proton közti kölcsönhatás. Az átlagos potenciálra és maradék kölcsönhatásra való felbontást oly módon végezzük, hogy  $v_s = V_{np}$ -t írunk. Itt a következő közelítéseket alkalmazzuk:

1.  $V_{np}$  spin függését elhagyjuk:  $v_s = V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p)$ .
2.  $V_{pA}(\xi, \vec{r}_p' \sigma_p)$  helyett annak átlagát, a  $\bar{V}(r_p')$ -vel jelölt optikai potenciál és Coulomb-potenciál összegét írjuk.

Ezek alapján a keresett reakció-mátrixelem:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_p \mu_p, b \beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha \alpha \rangle &\simeq \\ &\simeq \langle \varphi_p^{(-)}(\mathbf{k}_p, \vec{r}_p') \psi_{b\beta}(\xi, \vec{r}_n \sigma_n) \chi_{\mu_p}(\sigma_p) | V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p') | \psi_{\alpha\alpha}(\xi) \times \\ &\quad \times \psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \chi_{\mu_d}(\sigma_n \sigma_p) \varphi_d^{(+)}(\mathbf{k}_d, \vec{r}_n, \vec{r}_p) \rangle = \\ &= \int \varphi_p^{(-)*}(\mathbf{k}_p, \vec{r}_p') \chi_{\mu_p}^{+}(\sigma_p) \psi_{b\beta}^{+}(\xi, r_n \sigma_n) V_{np}(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \times \\ &\quad \times \psi_{\alpha\alpha}(\xi) \psi_d(\vec{r}_n - \vec{r}_p) \chi_{\mu_d}(\sigma_n, \sigma_p) \varphi_d^{(+)}\left(\mathbf{k}_d, \frac{\vec{r}_n + \vec{r}_p}{2}\right) d\xi d\vec{r}_n d\vec{r}_p d\sigma_n d\sigma_p. \end{aligned} \quad (\text{F28})$$

Végül még megjegyezzük, hogy az  $R$  mátrixelem itt használt normálásával, mint az  $\Psi_{r,i}^{(+)}$  F 26-ban felírt alakjából könnyen megmutatható, a differenciális hatáskeresztmetszet így írható:

$$\frac{d\sigma_{\alpha\mu_d, \beta\mu_p}}{d\Omega_p} = \frac{M_d^* M_p^* k_p}{4\pi^2 \hbar^4 k_d} |\langle \mathbf{k}_p \mu_p, b\beta | R_n | \mathbf{k}_d \mu_d, \alpha\alpha \rangle|^2. \quad (\text{F29})$$

III. Függelék. A  $Q_{k_p \times p, k_b \times b}^{(v)}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb, LL')$  vegyes sűrűségtenzor kiszámítása

A 21 képletben megadott reláció megfordítása:

$$B_{l_n \lambda_n} B_{l'_n \lambda'_n}^* = \sum_{k_l \times l} (-1)^{l'_n - \lambda'_n} (l_n \lambda_n, l'_n - \lambda'_n | k_l \times l) Q_{k_l \times l}(l_n, l'_n). \quad (\text{F30})$$

A sűrűségmátrix 20-ban megadott alakját, valamint  $B_{l_n \lambda_n} B_{l'_n \lambda'_n}^*$  itt felírt kifejezését 22-be helyettesítjük:

$$\begin{aligned} Q_{k_p \times p, k_b \times b}^{(v)}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, bb, LL') &= \frac{1}{3\hat{a}^2} \langle c || L\pi || b \rangle \langle c || L'\pi' || b \rangle \times \\ &\times \sum_{\substack{l_n l'_n j_n j'_n \\ k_l \times l}} \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} Q_{k_l \times l}(l_n l'_n) \hat{l}_n \hat{l}'_n \times \\ &\times \sum_{\substack{\alpha\mu_d \beta\beta' \\ \mu_p \mu_p' \mu_n \mu_n' \\ \lambda_n \lambda_n m_n m_n'}} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu'_p} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} - \mu'_p | k_p \times p) (-1)^{l'_n - \lambda'_n} (l_n, \lambda_n, l'_n - \lambda'_n | k_l \times l) (-1)^{b - \beta'} \times \\ &\times (b\beta, b - \beta' | k_b \times b) (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1\mu_d) (l_n \lambda_n, \frac{1}{2} \mu_n | j_n m_n) (\alpha\alpha, j_n m_n | b\beta) \times \\ &\times (\frac{1}{2} \mu'_p, \frac{1}{2} \mu'_n | 1\mu_d) (l'_n \lambda'_n, \frac{1}{2} \mu'_n | j'_n m'_n) (\alpha\alpha, j'_n m'_n | b\beta'). \end{aligned} \quad (\text{F31})$$

Végezzük el először a  $\mu_p \mu'_p \mu_d$ -re való összegezést. A kérdéses összeg:

$$\sum_{\mu_p \mu'_p \mu_d} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu'_p} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} - \mu'_p | k_p \times p) (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1\mu_d) (\frac{1}{2} \mu'_p, \frac{1}{2} \mu'_n | 1\mu_d).$$

Itt a Clebsch—Gordan együtthatók szimmetriatulajdonságainak felhasználásával a következő indexcserét hajtsuk végre:

$$(\frac{1}{2} \mu'_p, \frac{1}{2} \mu'_n | 1\mu_d) = (-1)^{\frac{1}{2} - \mu'_p} \frac{1}{\frac{1}{2}} (1\mu_d, \frac{1}{2} - \mu'_p | \frac{1}{2} \mu'_n),$$

$$(\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1\mu_d) = (\frac{1}{2} \mu_n, \frac{1}{2} \mu_p | 1\mu_d).$$

Ezeket az átalakításokat beírva az összegbe, már minden további nélkül alkalmazhatjuk a Clebsch—Gordan együtthatók összegére a IV. Függelékben megadott kép-



letet. Az összegezés eredménye:

$$\sum_{\mu_p \mu_p' \mu_d} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu_p'} (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} - \mu_p' | k_p \kappa_p) (\frac{1}{2} \mu_p, \frac{1}{2} \mu_n | 1 \mu_d) (\frac{1}{2} \mu_p', \frac{1}{2} \mu_n' | 1 \mu_d) =$$

$$= (-1)^{\kappa_p} \hat{1}^2 (-1)^{\frac{1}{2} - \mu_n'} (\frac{1}{2} \mu_n', \frac{1}{2} - \mu_n' | k_p - \kappa_p) W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}; 1 k_p). \quad (F32)$$

Hasonlóan járunk el az  $\alpha\beta\beta'$ -re való összegezésnél is. Így ennek az összegezésnek az eredménye:

$$\sum_{\alpha\beta\beta'} (\alpha\alpha, j_n m_n | b\beta) (\alpha\alpha, j_n' m_n' | b\beta') (-1)^{b-\beta'} (b\beta, b-\beta' | k_b \kappa_b) =$$

$$= (-1)^{b-a+j_n-k_b} \hat{b}^2 (-1)^{j_n'-m_n'} (j_n m_n, j_n' - m_n' | k_b \kappa_b) W(j_n b j_n' b; a k_b). \quad (F33)$$

F 32-t és F 33-at F 30-ba helyettesítjük. Ekkor még összegeznünk kell  $\lambda_n \lambda_n' m_n m_n' \mu_n \mu_n'$ -re. Az összegjel alatt öt Clebsch—Gordan együttható áll. Ez az összeg a IV. Függelékben megadott képletek szerint éppen egy 9j szimbólumot szolgáltat:

$$\sum_{\substack{\lambda_n \lambda_n' \\ m_n m_n' \\ \mu_n \mu_n'}} (l_n \lambda_n, \frac{1}{2} \mu_n | j_n m_n) (l_n' \lambda_n', \frac{1}{2} \mu_n' | j_n' m_n') (-1)^{l_n'-\lambda_n'} (l_n \lambda_n, l_n' - \lambda_n' | k_l \kappa_l) \times$$

$$\times (-1)^{\frac{1}{2} - \mu_n'} (\frac{1}{2} \mu_n, \frac{1}{2} - \mu_n' | k_p - \kappa_p) (-1)^{j_n'-m_n'} (j_n m_n, j_n' - m_n' | k_b \kappa_b) =$$

$$= \hat{k}_l \hat{k}_p \hat{j}_n \hat{j}_n' (k_l \kappa_l, k_p - \kappa_p | k_b \kappa_b) \begin{Bmatrix} l_n & l_n' & k_l \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & k_p \\ j_n & j_n' & k_b \end{Bmatrix}.$$

Ezen összefüggés felhasználásával sűrűségtenzorunk végül is a következő alakban írható:

$$Q_{k_p \kappa_p, k_b \kappa_b}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL') = \langle c \| L\pi \| b \rangle \langle c \| L'\pi' \| b \rangle \sum_{\substack{l_n l_n' j_n j_n' \\ k_l \kappa_l}} \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j_n' l_n'}^{ba} \frac{\hat{b}^2}{\hat{a}^2} \hat{l}_n \hat{l}_n' \hat{j}_n \hat{j}_n' \hat{k}_l \hat{k}_p \times$$

$$\times (-1)^{j_n+b-a-k_b-\kappa_p} Q_{k_l \kappa_l}(l_n l_n') W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}; 1 k_p) W(j_n b j_n' b; a k_b) \times$$

$$\times (k_l \kappa_l, k_p - \kappa_p | k_b \kappa_b) \begin{Bmatrix} l_n & l_n' & k_l \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & k_p \\ j_n & j_n' & k_b \end{Bmatrix}. \quad (F34)$$

Ebből az általános képletünkéből írjuk még fel a többször felhasználásra kerülő  $Q_{00,00}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb)$ ,  $Q_{10,00}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb)$  és  $Q_{00,00}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb)$  sűrűségtenzorokat. Itt

$$Q_{k_p \kappa_p, k_b \kappa_b}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb) = \sum_{L\pi, L'\pi'} \delta_{L\pi, L'\pi'} Q_{k_p \kappa_p, k_b \kappa_b}^{(v)}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL').$$

A 24 figyelembevételével látható, hogy  $Q_{k_p \kappa_p, k_b \kappa_b}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb)$  nem más, mint a  $\langle c \| L\pi \| b \rangle \langle c \| L'\pi' \| b \rangle$  elhagyásával felírt  $Q_{k_p \kappa_p, k_b \kappa_b}^{(v)}(\frac{1}{2} \frac{1}{2}, bb, LL')$  sűrűségtenzor.

Az F 34 képlet specializálásával a keresett sűrűségtenzorok:

$$\varrho_{00,00}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb) = \frac{\hat{b}}{\hat{\frac{1}{2}}^3 \hat{a}^2} \sum_{l_n j_n} \theta_{j_n l_n}^{ba2} \hat{l}_n \varrho_{00}(l_n l_n); \quad (\text{F35})$$

$$\varrho_{10,00}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb) = \frac{\hat{b}}{3^{3/2} \hat{\frac{1}{2}} \hat{a}^2} \sum_{l_n j_n} \theta_{j_n l_n}^{ba2} (-1)^{j_n - l_n - \frac{1}{2}} \frac{[l_n(l_n+1)(2l_n+1)]^{1/2}}{2j_n+1} \varrho_{10}(l_n l_n); \quad (\text{F36})$$

$$\begin{aligned} \varrho_{00,k0}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}, bb) &= (-1)^{b-a+\frac{1}{2}} \frac{\hat{b}^2}{\hat{\frac{1}{2}}^3 \hat{a}^2} \sum_{l_n l'_n j_n j'_n} (-1)^{l'_n} \hat{l}_n \hat{l}'_n \hat{j}_n \hat{j}'_n \varrho_{k0}(l_n l'_n) \theta_{j_n l_n}^{ba} \theta_{j'_n l'_n}^{ba} \times \\ &\times W(j_n b j'_n b; ak) W(j_n l_n j'_n l'_n; \tfrac{1}{2} k). \end{aligned} \quad (\text{F37})$$

IV. Függelék. A levezetések során felhasznált Racah algebrai összefüggések

$$\begin{aligned} (a\alpha, b\beta | c\gamma) &= (b - \beta, a - \alpha | c - \gamma) \\ &= (-1)^{a+b-c} (b\beta, a\alpha | c\gamma) \\ &= (-1)^{a+b-c} (a - \alpha, b - \beta | c - \gamma) \\ &= (-1)^{a-\alpha} \frac{\hat{c}}{\hat{b}} (a\alpha, c - \gamma | b - \beta) \\ &= (-1)^{b+\beta} \frac{\hat{c}}{\hat{a}} (c - \gamma, b\beta | a - \alpha) \end{aligned}$$

$$\sum_{\beta\delta\epsilon} (a\alpha, b\beta | e\epsilon) (e\epsilon, d\delta | c\gamma) (b\beta, d\delta | f\varphi) = \hat{e}\hat{f}(a\alpha, f\varphi | c\gamma) W(abcd; e\hat{f})$$

$$\sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \beta\beta' \\ \gamma\gamma'}} (a\alpha, b\beta | c\gamma) (a'\alpha', b'\beta' | c'\gamma') (-1)^{a'-\alpha'} (a\alpha, a' - \alpha' | e\epsilon) (-1)^{b'-\beta'} \times$$

$$\times (b\beta, b' - \beta' | f\varphi) (-1)^{c'-\gamma'} (c\gamma, c' - \gamma' | d\delta) =$$

$$= \hat{e}\hat{f}\hat{c}\hat{c}'(e\epsilon, f\varphi | d\delta) \begin{Bmatrix} a & a' & e \\ b & b' & f \\ c & c' & d \end{Bmatrix}$$

$$(a\alpha, 00 | c\gamma) = \delta_{ac} \delta_{\alpha\gamma}$$

$$(a\alpha, b\beta | 00) = \frac{(-1)^{a-\alpha}}{\hat{a}} \delta_{ab} \delta_{\alpha, -\beta}$$

$$(-1)^{a-\alpha} \delta_{\alpha\alpha'} = \hat{a}(a\alpha, a - \alpha' | 00)$$

$$W(abcd; 0f) = (-1)^{b+c-f} \frac{\delta_{ab} \delta_{cd}}{\hat{a}\hat{c}}$$



$$W(abcd; e0) = (-1)^{b+c-e} \frac{\delta_{ac} \delta_{bd}}{\hat{a} \hat{b}}$$

$$\begin{Bmatrix} a & a' & e \\ b & b' & f \\ c & c' & 0 \end{Bmatrix} = \delta_{cc'} \delta_{ef} \frac{(-1)^{e+c-a-b'}}{\hat{e} \hat{c}} W(bb' aa'; ec)$$

$$\begin{Bmatrix} a & a' & 0 \\ b & b' & 0 \\ c & c' & 0 \end{Bmatrix} = \frac{\delta_{aa'} \delta_{bb'} \delta_{cc'}}{\hat{a} \hat{b} \hat{c}}.$$

#### V. Függelék. A véletlen koincidenciák számítása

Jelöljük  $q_p(t_p)$ -vel a protonimpulzusok sűrűségét a  $t_p$  időpontban,  $q_\gamma(t_\gamma)$ -val a  $\gamma$  impulzusok sűrűségét a  $t_\gamma$  időpontban,  $\varepsilon(t_\gamma - t_p)$ -vel annak a valószínűségét, hogy a koincidencia-kör koincidenciát jelez, ha a két bemenetére jutó két jel között  $t_\gamma - t_p$  időkülönbség van. Tegyük fel továbbá, hogy annak a valószínűsége, hogy a koincidencia-kör egyik bemenetére  $\tau$  időn belül két impulzus érkezik, elhanyagolható. Itt  $\tau$ -val a koincidencia-kör felbontási idejét jelöltük. Ekkor, mint az könnyen belátható,  $T$  idő alatt egy egyszerű koincidencia kör esetén a véletlen koincidenciák száma:

$$N_v(T) = \int_{-T/2}^{+T/2} \varepsilon(t_\gamma - t_p) q_\gamma(t_\gamma) q_p(t_p) dt_\gamma dt_p. \quad (F38)$$

Ebből a képletből konstans impulzussűrűség esetén megkapjuk a közismert

$$n_v \text{ sec}^{-1} = 2\tau n_\gamma \text{ sec}^{-1} n_p \text{ sec}^{-1} \quad (F39)$$

összefüggést, ahol  $\tau$  a koincidencia kör felbontási ideje.

Ciklotron mellett végzett méréseknél azonban az impulzussűrűségek korántsem konstansok. A ciklotronból a bombázó ionok csomagokban jönnek. Jelöljük a két csomag közt eltelt időt  $T$ -vel, egy csomag időbeli szélességét pedig  $\tau_i$ -vel. Ekkor, ha a detektorok háttérmentesen detektálnak, akkor a  $q_\gamma$  és  $q_p$  impulzussűrűségek is ilyen pulzációval fognak rendelkezni. Ha azonban az egyik detektor (pl. a mi esetünkben a  $\gamma$  detektor) valamilyen felaktiválódásból származó, időben konstans háttérrel is detektál, akkor a pulzáció erre a konstans háttérre ül rá. E konstans háttérimpulzusok száma általában arányosnak tekinthető a ciklotron-impulzus alatt befutó nem háttér impulzusok számával. Jelöljük ezt az arányossági tényezőt  $\eta$ -val:

$$\eta = \frac{\text{a konst. háttérimpulzusok várható száma a ciklotronimpulzus tartama alatt}}{\text{a nem háttérimpulzusok várható száma a ciklotronimpulzus tartama alatt}}. \quad (F40)$$

Jelöljük továbbá  $\theta$ -val a ciklotronimpulzusok  $T$  időbeli távolságának a  $\tau_i$  időbeli tartamához való arányát. Tegyük fel, hogy  $q_p(t_p)$  négyszögimpulzusokkal,  $q_\gamma(t_\gamma)$  pedig konstans háttérrel ültetett négyszögimpulzusokkal közelíthető. Tegyük fel

még azt is, hogy  $\varepsilon(t)$   $2\tau$  szélességű, egységnyi magasságú négyszögfüggvény. Ebben az esetben az F 38 integrálból a következő formulát nyerhetjük:

$$n_v \text{ sec}^{-1} = 2\tau_{eff} n_p \text{ sec}^{-1} n_\gamma \text{ sec}^{-1}, \quad (\text{F41})$$

ahol

$$\tau_{eff} = \theta \frac{1 + \eta - \frac{\tau}{2\tau_i}}{1 + \theta\eta} \tau, \quad (\text{F42})$$

és  $n_p \text{ sec}^{-1}$  ill.  $n_\gamma \text{ sec}^{-1}$  a proton ill.  $\gamma$ -detektorok által másodpercenként számlált impulzusok átlagos száma.

Az eddigi képletek egyszerű koincidenca-körre érvényesek. A gyors-lassú koincidenca kör esetén a fenti típusú véletlen koincideneciák mellett még két további véletlen koincidenca-típus is ad járulékot. Ezek közül az egyik a lassú, hármas-koinc. körben létrejövő hármas véletlen koincidenca, mely  $\tau_{lassú}^2$ -vel arányos. A véletlen koincideneciák harmadik típusa pedig a következő módon jön létre. Az egyik (pl. a proton) detektorból olyan jelet kapunk, mely az energia-választó diff. diszkriminátor kapujában benne van. Ezt követő  $\tau_{gyors}$  időn belül érkezik egy  $\gamma$  impulzus, mely most a gyorskoincidenca-kört működésre bírja ugyan, de a  $\gamma$  oldali energia-választó diszkriminátort nem. Ezután  $\tau_{lassú}$  időn belül érkezik egy újabb  $\gamma$  impulzus, mely a  $\gamma$  oldali energia-választó diff. diszkriminátort megszólaltatja.

Mindhárom típusú véletlen koincideneciát figyelembe véve, konstans impulzus-sűrűség esetére a következő képletet nyerhetjük:

$$n_{vél} \text{ sec}^{-1} = n_p \text{ sec}^{-1} n_\gamma \text{ sec}^{-1} \{ 2\tau_g + 3\tau_l^2 n_{gy} \text{ sec}^{-1} + 4\sqrt{2\tau_g \tau_l} \sqrt{n_{gy} \text{ sec}^{-1}} \}, \quad (\text{F43})$$

ahol  $\tau_g$  és  $\tau_l$  a gyors ill. lassú koincidenca-kör felbontási ideje;  $n_{gy} \text{ sec}^{-1}$  a gyors-koincidenca-körből jövő impulzusok másodpercenkénti száma. A ciklotron melletti méréseknél pedig, a fent tárgyalt feltételek mellett a következő kifejezést írhatjuk fel:

$$n_{vél} \text{ sec}^{-1} = 2\tau_{eff} n_p \text{ sec}^{-1} n_\gamma \text{ sec}^{-1}, \quad (\text{F44})$$

ahol

$$\tau_{eff} = \theta \frac{1 + \eta - \frac{\tau_g}{2\tau_i}}{1 + \theta\eta} \tau_g + \frac{3}{2} \tau_l^2 n_{gy} \text{ sec}^{-1} + 2\tau_l \left[ \frac{2\tau_g \theta}{1 + \eta} \right]^{\frac{1}{2}} \sqrt{n_{gy} \text{ sec}^{-1}}. \quad (\text{F45})$$



## IRODALOM

- [1] *A. M. Lane and R. G. Thomas*, *Rev. Mod. Phys.* **30** 257 1958 összefoglaló cikk
- [2] *J. Humblet and L. Rosenfeld*, *Nucl. Phys.* **26**, 529, (1961).
- [3] *S. T. Butler*, *Proc. Roy. Soc. Lond A* **208**, 559, 1951.
- [4] *A. B. Bhatia, K. Huang, R. Huby and H. C. Newns*, *Phil. Mag.* **43**, 485, 1952.
- [5] *F. Coester*, *Phys. Rev.* **89**, 619, 1953.
- [6] *F. Coester and J. M. Jauch*, *Helv. phys. Acta* **26**, 3, 1953.
- [7] *A. R. Edmonds*, *Elementary Theory of Angular Momentum*.
- [8] *M. H. Hull and G. Breit*, *Handbuch der Physik*, **41**, 410.
- [9] *L. C. Biedenharn and M. E. Rose*, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 729, 1953.
- [10] *P. B. Daitch and J. B. French*, *Phys. Rev.* **87**, 900, 1952.
- [11] *G. Satchler and W. Tobocman*, *Phys. Rev.* **118**, 1566, 1960.
- [12] *Menyhárd N. és Zimányi J.*, *ZSETF* **41**, 1185, 1961.
- [13] *J. E. Bowcock*, *Proc. Phys. Soc. (London) A* **68**, 512, 1955.
- [14] *R. D. Amado*, *Phys. Rev. Letters* **2**, 399, 1959.
- [15] *J. S. Shapiro*, *Nucl. Phys.* **28**, 244, 1961.
- [16] *Menyhárd N. és Zimányi J.*, *Nucl. Phys.* **29**, 687, 1962.
- [17] *S. B. Gunst and L. A. Page*, *Phys. Rev.* **90**, 970, 1953.
- [18] *P. Argyres and C. Kittel*, *Acta Metallurgica*, **1**, 241, 1953.
- [19] *Menyhárd N. és Zimányi J.* előadása az 1961 évi balatonföldvári Elméleti Fizikai Kollokviumon.
- [20] *J. E. Bowcock*, *Phys. Rev.* **112**, 923, 1958.
- [21] *A. P. French*, *Phys. Rev.* **107**, 1655, 1957.
- [22] *A. Ajzenberg-Selove and T. Lauritsen*, *Nucl. Phys.* **11**, 103, 1959.
- [23] *S. A. Cox and R. M. Wilkinson*, *Phys. Rev.* **105**, 1799, 1955.
- [24] *A. J. Fergusson et al.* *Phys. Rev. Letters*, **1**, 414, 1958.
- [25] *J. C. Hensel and W. C. Parkinson*, *Phys. Rev.* **110**, 128, 1958.
- [26] *R. C. Johnson*, *Nucl. Phys.* **35**, 654, 1962.
- [27] *J. Zimányi*, *Nucl. Phys.* **6**, 625, 1958.
- [28] *K. Nagy and J. Zimányi*, *Nucl. Phys.* **9**, 329, 1958.
- [29] *J. Zimányi*, *Nucl. Phys.* **10**, 88, 1959.
- [30] *J. Zimányi*, Circular polarization of gamma-radiation following a deuteron stripping reaction. Előadás az 1960 évi balatonöszödi Magfizikai Kollokviumon.
- [31] *G. R. Satchler*, *Nucl. Phys.* **16**, 674, 1960.





# NEM KRISTÁLYOS ANYAGOK RÖNTGEN FINOMSZERKEZETÉNEK KUTATÁSA\*

TOMPA JÁNOS

European Research Associates, Brüsszel

Szeretném elmondani, hogy mennyire meg vagyok hatódva és hogy milyen nagy megbecsülésnek veszem, hogy erről a helyről szólhatok Önökhöz. Hálával emlékezek itt meg a Magyar Tudományos Akadémia vezetőségéről a kedves meghívásért, mely ezt az előadást lehetővé tette és itt mindjárt szeretném megkérni *Szigeti György* akadémikus urat, hogy tolmácsolja meleg köszönetemet az Akadémia elnöksége felé.

Egy darabig latolgattam, hogy angolul beszéljek-e avagy magyarul. Tudományos tárgykörben angolul könnyebben fejezem ki magamat, viszont a magyar az anyanyelvem. Annak ellenére, hogy másoknak mindig azt tanácsolom, hogy egy előadás nyelve mindig az legyen, amelyik az előadónak könnyebb, érzelmi okokból, mégis, itt a magyar nyelvet választottam. — Ezért kérem előre is elnézésüket az én eléggé kopott magyar nyelvezetemért, és éppen ez oknál fogva az előadást angolul fogom folytatni, ha az érthetatlenné válna.

Előadásom tárgyául a nem-kristályos anyagok röntgen finomszerkezet kutatását választottam. Ez a tudománynak egy olyan területe, amellyel a röntgen szerkezetkutatás kezdetén nem igen foglalkoztak; amikor a röntgendiffrakció jelenségének lehetőségeit feltárták, azt elsősorban csak a kristályos anyagok szerkezetének meghatározására használták, és itt érték el nagy tudományos eredményeket mind gyakorlati mind elméleti vonalon.

A nem-kristályos anyagok szerkezetmeghatározása eléggé mellőzve volt, noha nem is teljesen, gondoljunk csak itt pl. *Debye*, *Zernike* és *Prinz* ezen a területen végzett klasszikus munkáira.

Az utóbbi években azonban a nem-kristályos anyagok szerkezetének meghatározása is igen nagyot haladt. Az elért eredmények egy része a mi kutatóintézetünkben, *Dr. W. Ruland* vezetése alatt álló csoport munkájának eredménye. Jómagam az ilyen irányú kutatás elméleti területein, és a problémák matematikai részének megvitatásával járulok hozzá a kutatáshoz.

Bízom abban, hogy annak ellenére, hogy a munkák legnagyobb része közleményekben megjelent, vagy meg fog jelenni, ez a rövid összefoglaló előadás mégis érdekelni fogja a hallgatóságot. Említsük itt talán még meg, hogy az utolsó évek folyamán e területen elért tudományos haladás nemcsak az egyéni rátermettség, hanem nagyrésztben a tudományos készülékek és felszerelési tárgyak nagymértékű fejlődésének következménye. A műszerek és mérőberendezések tökéletesedése, valamint a számolás megkönnyítése és lerövidítése az elektronikus számítóberendezések

\* A Magyar Tudományos Akadémia III. Osztálya és az Eötvös Loránd Fizikai Társulat rendezésében 1964. december 2-án tartott előadás.



segítségével különösen a nem-kristályos anyagok szerkezetmeghatározásának területén döntő fontosságúnak bizonyult.

Hogy bemutassam az alapvető különbséget a kristályos és nem-kristályos anyagok szerkezetmeghatározásánál, engedjék meg, hogy visszanyúljak a röntgenszórás néhány alapvető kérdésére. Ismeretes, hogy ha egy párhuzamos és  $I_0$  intenzitású röntgensugárnyaláb, mint minden más oszcilláló elektromágneses tér, útjába egy töltött részecske kerül, a részecske hullámkibocsátó centrummá válik, és az egységnyi szög alatt sugárzott energia, mely a beeső sugárnyalábbal  $2\theta$  szöget zár be:

$$I_e = I_0 r_e^2 (1 + \cos^2 2\theta) / 2,$$

ahol  $r_e$  az úgynevezett klasszikus elektronsugár,  $2,82 \cdot 10^{-13}$  cm. Ez a szórt sugárzás koherens, fázisa a beeső sugárzás fázisától függ. Mivel a sugárzás koherens, a különböző pontokról szórt sugárnyalábok fázisaik szerint interferálhatnak.

Ezen interferenciából ki lehet számítani pl. a hidrogénatom egyetlen elektronja által szórt sugárzást. A kvantummechanika bizonyítja ugyanis, hogy az elektron az atommag körül bárhol egy bizonyos valószínűséggel megtalálható, vagyis az elektront egy elektronfelhővel helyettesíthetjük, amelynek a töltéssűrűsége, az elektron töltéséhez mint egységhez viszonyítva, az  $\bar{r}$  vektor által megadott helyen  $\varrho(\bar{r})$ . A  $\varrho$  függvény kiszámítása a kvantummechanika törvényeinek segítségével elvileg lehetséges, azonban eléggé bonyolult és gyakorlatilag csak elektronikus számítógépekkel vihető keresztül. A szórt sugár az egyes  $dv$  térfogatelemeken szóródó hullámok összege. A térfogatelemek töltése  $\varrho dv$ , így a szórt sugárzás amplitúdója  $A(\bar{s}) = A_e \int \varrho(\bar{r}) \exp(-2\pi i \bar{r} \bar{s}) dv$ , ahol  $A_e$  az egyetlen elektron által szórt sugárzás amplitúdója és az  $\bar{s}$  vektor a beeső és a szórt sugárzás egységvektorának a különbsége, egységnyi hullámhosszúságra vonatkoztatva,  $\bar{s} = (\bar{e}_s - \bar{e}_b) / \lambda$  ( $\bar{e}_b$  és  $\bar{e}_s$  a beeső és a szórt sugár irányainak egységvektorai) és nagysága  $s = 2 \sin \theta / \lambda$ . Ha az integrál eredményét kis  $f$ -fel jelöljük, az egy atomról szórt sugárzás intenzitása  $I_e$  helyett  $f^2 I_e$ , ahol  $f$  a jól ismert atomtényező.

A kvantummechanikai számítások azt is mutatják, hogy a koherens szórásen kívül van egy másik, inkohere ns szórás, amelynek hullámhosszúsága a beeső sugár hullámhosszúságától különböző. Ez a röntgenszórás, amit Compton-sugárzásnak hívnak, a beeső foton és az elektron közötti ütközés eredményének fogható fel, ha a problémát korpuszkulárisan szemléljük. A Compton- vagy inkohere ns szórás intenzitása  $(1 - f^2) I_e$ , úgy, hogy a koherens és inkohere ns szórás összege azonos  $I_e$ -vel, vagyis az egyetlen szabad elektron által szórt sugárzás erősségével. Ha a szórás szöge nagyon kicsiny ( $2\theta \approx 0$ ),  $f = 1$  és a szórt sugárzás tisztán koherens; ha a szórás szöge nagy,  $f$  értéke zérushoz közelít, úgy hogy a szórt sugárzás teljesen inkohere nsse válik.

Ha az atom egynél több elektront tartalmaz, a koherens szórás intenzitását a fentihez hasonló kifejezés adja meg. Ebben a kifejezésben azonban  $\varrho(\bar{r})$  az atom összes elektronjának a töltéssűrűségét képviseli. Végetetül is, ha a szóróközeg több atomból áll, és a  $j$ -edik atom atomtényezője  $f_j$ , akkor a szórt sugárzás amplitúdója  $A(\bar{s}) = \sum_j f_j \exp(-2\pi i \bar{r} \bar{s})$ . A szóró közeget tekinthetjük azonban úgy is, mint az egyes  $j$  atomoktól független elektronsűrűséget  $\varrho(\bar{r})$ , mely a térben egy folytonos, de minden pontban változó töltésként van elosztva. Ekkor az ampli-



túdó az előző kifejezés helyett megint a már felírt  $A(\vec{s}) = \int \varrho(\vec{r}) \exp(-2\pi i \vec{r} \vec{s}) dv$  alakot veszi fel.

Ez az egyenlet az alapegyenlete minden<sup>\*</sup> röntgen finomszerkezet kutatásnak. Az egyenlet megadja a tetszőleges elektronsűrűségű közeg által szórt sugárzás amplitúdóját a tér bármely irányában, egy adott beeső röntgennyaláb esetén. A matematikai összefüggés  $A$  és  $\varrho$  között az, hogy  $A$  a  $\varrho$  függvény Fourier integrálja vagy Fourier transzformáltja: következésképpen az  $\vec{r}$  vagy reális térben található bármilyen elektronsűrűség eloszlásnak megfelel az  $\vec{s}$ , Fourier- vagy reciproktérben egy amplitúdó eloszlás: a Fourier-integrál a reális teret a Fourier-térre transzformálja át.

A matematikában ismert az inverz transzformáció is:

$$\varrho(\vec{r}) = \int A(\vec{s}) \exp(2\pi i \vec{r} \vec{s}) dv_s,$$

ahol az integrál kiterjed az egész reciproktérre és ahol  $dv_s$  a reciproktérnek egy téreleme. Itt mindjárt látható, hogy a szerkezet teljes leírásához, vagyis a  $\varrho(\vec{r})$  eloszlás ismeretéhez a reciproktér minden pontjához tartozó  $A(\vec{s})$  amplitúdó ismerete szükséges, vagyis mérnünk kell a szórt sugárzás amplitúdóját a tér minden irányában ahhoz, hogy az inverz Fourier integrállal  $\varrho(\vec{r})$  értékét kiszámíthassuk. Sajnos, ez a gyakorlatban keresztülvihetetlen: Az  $A$  komplex mennyiség, amelynek meghatározásához abszolút értékének és fázisának ismerete szükséges; az intenzitás mérésekor azonban csak az abszolút értéket tudjuk meghatározni a fázis nélkül:  $I(\vec{s}) = |A(\vec{s})|^2 = A(\vec{s}) \cdot A^*(\vec{s})$ , ahol  $A^*(\vec{s})$  az  $A(\vec{s})$  konjugált komplexje. Ez a probléma, az úgynevezett fázis probléma, a kristályszerkezetkutatás központi kérdése, és talán egy kicsit ironikus az, hogy miután a tökéletes szerkezet-meghatározás lehetőségét bemutattuk azáltal, hogy felírtuk  $\varrho(\vec{r})$  és  $A(\vec{s})$  egyenletét, reményeink összedőlnek azáltal, hogy  $A(\vec{s})$ -et csak részben tudjuk meghatározni. A fázisprobléma kiküszöbölésére számos megoldással próbálkoztak, ezt a kérdést azonban itt nem akarom érinteni, annál is inkább sem, mert teljes általános megoldás nem ismeretes.

Nézzük inkább meg, milyen adatok birtokába juttat az intenzitásnak vagyis sugárzás-erősségnek mérése. Az  $I(\vec{s})$  függvény két tényező szorzatával egyenlő és az egyik alapvető Fourier-teoréma szerint, (amely természetesen az inverz Fourier-integrálra is érvényes) egy szorzat Fourier-integrálja a tényezők Fourier-integráljának konvolúciójával egyenlő: vagyis ha  $F(\vec{s})$  az  $f(\vec{r})$  Fourier-transzformáltja,  $\mathfrak{F}f(\vec{r}) = F(\vec{s})$ , és úgyszintén  $\mathfrak{F}g(\vec{r}) = G(\vec{s})$ , akkor  $\mathfrak{F}[f(\vec{r}) \cdot g(\vec{r})] = F(\vec{s}) * G(\vec{s})$ . Mint ismeretes, a konvolúció definíciója  $F(\vec{s}) * G(\vec{s}) = \int F(\vec{t}) G(\vec{s} - \vec{t}) dv_t$ , ahol a csillag a konvolúciós műveletet jelképezi, és ahol az integrálás a  $\vec{t}$  vektor minden lehetséges értékére kiterjed. A fenti tétel megfordítható: két függvény konvolúciójának Fourier-transzformáltja a függvények Fourier-transzformáltjának a szorzata.

Ha  $\varrho(\vec{r})$  Fourier-integrálja  $A(\vec{s})$ , akkor  $A^*(\vec{s}) = \int \varrho(\vec{r}) \exp(2\pi i \vec{r} \vec{s}) dv = \int \varrho(-\vec{r}) \exp(-2\pi i \vec{r} \vec{s}) dv = \int \varrho'(\vec{r}) \exp(-2\pi i \vec{r} \vec{s}) dv$ , úgyhogy  $A^*(\vec{s})$  a  $\varrho'(\vec{r})$  függvény Fourier-transzformáltja, ahol  $\varrho'(\vec{r}) = \varrho(-\vec{r})$ . Tehát  $A(\vec{s})$ -nek az inverz Fourier-transzformáltja  $\varrho(\vec{r})$  és  $A^*(\vec{s})$ -nek  $\varrho'(\vec{r})$ , következésképp az  $A(\vec{s}) \cdot A^*(\vec{s})$  szorzatnak a Fourier-transzformáltja a  $\varrho(\vec{r})$  és  $\varrho'(\vec{r})$  függvények konvolúciója  $\varrho(\vec{r}) * \varrho'(\vec{r}) = \int \varrho(\vec{t}) \varrho'(\vec{r} - \vec{t}) dv_t = \int \varrho(\vec{t}) \varrho(\vec{t} - \vec{r}) dv_t = \int \varrho(\vec{t} + \vec{r}) \varrho(\vec{t}) dv_t$ , vagyis az intenzitás



inverz Fourier-transzformáltja a fenti kifejezés, amelyet autokorrelációs függvénynek neveznek és melynek jelölése  $\bar{q}^{*2}(\bar{r})$ . Röntgenintenzitás mérésből tehát nem az elektron sűrűségeloszlást, hanem annak csak autokorrelációs függvényét kapjuk meg. Ezeket az alapvető összefüggéseket a következő sémával szemléltethetjük:

$$\begin{array}{ccc} q(\bar{r}) & \rightleftharpoons & A(\bar{s}) = \mathfrak{F}q(\bar{r}) \\ \downarrow & & \downarrow \\ \bar{q}^{*2}(\bar{r}) & \rightleftharpoons & I(\bar{s}) = A(\bar{s}) \cdot A^*(\bar{s}) = \mathfrak{F}\bar{q}^{*2}(\bar{r}). \end{array}$$

Látható, hogy  $q$ -ból  $A$ -t és  $A$ -ból  $q$ -t megkaphatjuk, úgyszintén mint  $I$ -ből  $\bar{q}^{*2}$ -t és  $\bar{q}^{*2}$ -ből  $I$ -t, továbbá kiszámíthatjuk  $q$ -ból  $\bar{q}^{*2}$ -t és  $A$ -ból  $I$ -t. E két utóbbi lépés azonban nem reverzibilis, tehát nem lehet a mért intenzitásból a gyakorlati kutatót érdeklő szerkezetet, vagyis  $q(\bar{r})$ -et, bármilyen esetben kiszámítani. A probléma leegyszerűsítve az algebrai gyökvonás problémájához hasonlítható, amely szerint  $x$  ismeretében  $x$  négyzet meghatározott, de  $x^2$ -ből elindulva  $x$  nincs meghatározva, hanem két különböző megoldást adhat.

Az előadás menetét egy pillanatra megszakítva e fenti példával szeretném aláhúzni a konvolúciós művelet és téoréma fontosságát a Fourier-transzformáció elméletében; különösen *Hosemann* berlini professzor érdeme, hogy újra és újra rámutatott a konvolúciós művelet fontosságára ezen a területen [1]. Egy másik fogalom, amely a Fourier-transzformáció elméletében nagy szerepet játszik és amely számos alkalmazásához az elméleti alapot megadja, a disztribúció fogalma. A disztribúciók elméletét *L. Schwarz* [2], a nagy francia matematikus fejlesztette ki. Én a magam részéről azt gondolom, hogy ez az elnevezés nem szerencsés, de *Schwarz* maga nevezte így el és meg kell hagyni az apának a jogot, hogy gyermekének nevét maga válassza meg.

A disztribúció fogalma a következő: ismeretes, hogy egy  $f(x)$  függvény az  $x$  értéke mellé rendel egy másik számot, tudniillik az  $f(x)$ -et. A  $\varphi(x)$  disztribúció az  $f(x)$  függvényhez rendel egy értéket, amely a következő integrállal van adva:

$\int \varphi(x)f(x)dx$ . A disztribúció-elmélet azért fontos, mert szilárd matematikai alapot ad sok olyan integrálnak, melynek határértékei végtelenek és melyek egyébként nem lennének értelmezve; az ilyen típusú integrálok a Fourier-transzformáció elméletben igen gyakoriak. Például  $1/r$  Fourier-transzformáltja  $-i\pi \operatorname{sgn}(s)$ , ahol  $\operatorname{sgn}(s)$  az előjelfüggvény, úgy hogy  $\operatorname{sgn}(s)$  inverz Fourier-transzformáltja  $i/\pi r$  kell

legyen, oly módon, hogy  $\int_0^\infty \sin(2\pi rs)ds$ -t egyenlővé kell tennünk  $1/2\pi r$ -el. Ha ezt a

határozott integrált a nulla és végtelen között megnézzük, láthatjuk, hogy nem konvergál, tehát nincs határértéke. A disztribúció elmélettel azonban az integrálhoz egy meghatározott értéket rendelhetünk és ezzel biztosítjuk azt, hogy a Fourier transzformációs elmélet a függvények egy nagy csoportjára kiterjeszthető. Szeretném úgyszintén megemlíteni az úgynevezett Dirac-delta függvényt,  $\delta(x)$ , amelynek az értéke a definíció szerint az  $x$  minden értékénél zérus, kivéve az  $x=0$  helyet,

ahol is értéke végtelen oly módon, hogy  $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1$ . Nyilvánvaló tehát, hogy

$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0)$  az  $f$  függvény értéke a zérus helyen, és ezért sokkal helyesebb



a Dirac  $\delta$  függvényt disztribúciónak tekinteni, amely egy  $f(x)$  függvényhez hozzárendeli az  $f(x)$  függvény értékét a zérus helyen. Így a *Dirac* függvény használata kielégítő matematikai bázist kap és felhasználásának helyességét ily módon még komplikált esetekben is könnyűszerrel megvizsgálhatjuk. Ha tehát a *Dirac* delta függvényét disztribúcióként értelmezzük, könnyen kimutathatjuk, hogy az eddigi alkalmazása általában helyes volt. Ezzel kapcsolatban, ha megengedek, elmondom a következő kis anekdótát: a helyzet olyan, mint ezelőtt 150 évvel, mikor fizikusok és matematikusok nagyban gyakorolták a függvények hatványsorokba való kifejtését, mielőtt még a konvergencia vizsgálatának elmélete kifejlődött volna. Azt mondják, hogy amikor *Cauchy* a konvergáló sorokról szóló híres értekezését a párizsi Tudományos Akadémián előadta, a hallgatóság számos tagja türelmetlenül várta a felolvasás végét, hogy hazarohanva megvizsgálhassa, hogy az eddig alkalmazott sorai konvergensek avagy sem. Nincs kétség afelől, hogy ténylegesen a legtöbb addig alkalmazott végtelen sor konvergens volt, hisz egy matematikai megoldás egy bizonyos intuícióval használva általában helyes eredményt ad, még akkor is, ha az exakt matematikai bázis nincs megteremtve. Másrésztől viszont kíváncsi, hogy az exakt matematikai fogalmazás rendelkezésünkre álljon, hogy megvédjen hamis eredmények megszületésétől. Ebből a szempontból igen örömteljes az a tény, hogy a Fourier-integrál elmélete a disztribúció elmélete által még szélesebb tudományos alappal rendelkezik.

Ezzel körülbelül röviden körvonaltam is a szerkezetmeghatározás elméleti alapját és a továbbiakban szeretnék néhány gyakorlati eredményről beszámolni.

Mint már ahogy előbb említettem, előadásomban nem érintem a kristályos anyagok szerkezetmeghatározását, ahol is a szerkezet térben ismétlődő (periodikus), és ennek következtében a  $\varrho(r)$  elektronsűrűség felírható úgy, mint az elemi cella  $\varrho_0(\vec{r})$  elektronsűrűsége és olyan delta disztribúciók konvolúciója, amelyek az elemi

cellát a tér három irányában megismétlik:  $\varrho(\vec{r}) = \varrho_0(\vec{r}) * \sum_p \delta(\vec{r} - \vec{r}_p)$ , ahol  $\vec{r}_p = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  és  $n_1, n_2, n_3$  egész számok. Miután  $A(\vec{s})$  a  $\varrho(\vec{r})$  függvény Fourier integrálja,  $A(\vec{s}) = \mathfrak{F}\varrho(\vec{r}) = \mathfrak{F}\varrho_0(\vec{r}) \cdot \sum_h \mathfrak{F}\delta(\vec{r} - \vec{r}_p) = (1/V_0) \mathfrak{F}\varrho_0(\vec{r}) \cdot \sum_h \delta(\vec{s} - \vec{s}_h)$ .

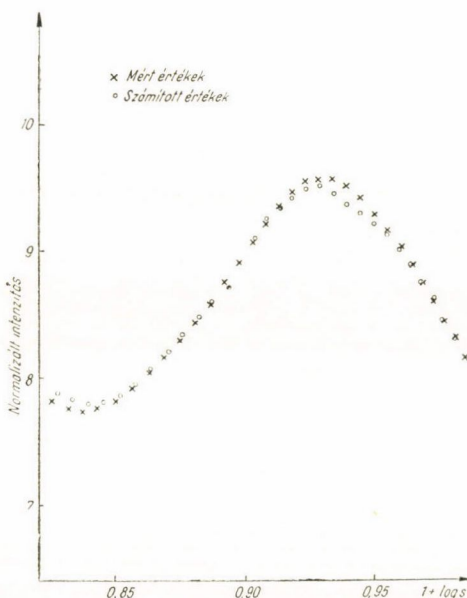
Ezzel ismét bemutattuk a konvolúció- és a disztribúció elmélet alkalmazását. Ebből az intenzitás kifejezése a következő lesz:  $I(\vec{s}) = (1/V_0^2) \mathfrak{F}\varrho_0^*(\vec{r}) \cdot \sum_h \delta(\vec{s} - \vec{s}_h)$ , ahol az  $\vec{s}_h$  vektorok a vizsgált kristály térrácsának megfelelő reciprokrácspontjainak rádiusz vektorai és  $V_0$  az elemi cella térfogata. Látható a fenti egyenletből, hogy az  $I(\vec{s})$  függvény csak az  $\vec{s}_h$  reciprokrácspontokban van értelmezve és zérus minden más helyen. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy a felvételen csak kristályos reflexiókat észlelünk és az észlelt reflexiók pontok intenzitása és helye a reciprokrács egy-egy rácspontjának felel meg. A röntgenkristallográfia ezekből a reflexiók pontokból vonja le következtetéseit. Ezzel ellentétben a nem-kristályos anyagok röntgenfelvétele  $\vec{s}$  minden értékénél mutat intenzitást és így elméletileg az előbbinél információban sokkal gazdagabb.

A gázok és a folyadékok a gyakorlatban legtöbbször előforduló nem-kristályos anyagok, e téren azonban a vizsgálat nem nagyon haladt előre. Véleményem szerint pillanatnyilag a tudományos előrehaladás a folyadékok elméleti fizikája terén fontos lenne, és igen valószínű, hogy e haladás megindításához éppen a röntgenvizsgálatok ilyen irányú kifejlesztése adhatná meg az indítékot. Laboratóriu-



munkban ehhez hasonló vizsgálatokat indított meg *dr. W. Ruland* akkor, amikor amorf szilárd, főleg aromás rendszerek szerkezetét vizsgálta [3]. Ezek az anyagok szénelegy részek (macerál) vagy aromás vegyületek polimerjei. Az észlelt szórt sugárzás intenzitása, mint ahogy láttuk, az autokorrelációs függvény Fourier integrálja. Ha az elektronsűrűséget úgy tekintjük, hogy az egyes atomok körül koncentrálódik, akkor a szórt sugárzás amplitúdója  $A(\bar{s}) = \sum_j f_j \exp(-2\pi i \bar{r}_j \bar{s})$  és az intenzitás pedig  $I(\bar{s}) = \sum_j \sum_k f_j f_k \exp(-2\pi i \bar{r}_{jk} \bar{s})$ ; ezenkívül ha feltételezzük, hogy szemcse-rendeződés nincs jelen, akkor írható, hogy  $I(\bar{s}) = \sum_j \sum_k f_j f_k \sin(2\pi \bar{r}_{jk} \bar{s}) / (2\pi \bar{r}_{jk} \bar{s})$ ,

ami a jólismert Debye-féle egyenlet és ahol  $\bar{r}_{jk}$  a  $j$ -edik és a  $k$ -adik atomok közötti távolság. Ily módon a felvett intenzitásgöréből a molekula  $r_{jk}$  atomtávolságai kiszámíthatók és így a molekula szerkezete megadható. Ha azonban, és ezzel az esettel találkozunk szén elegy részek esetében, nincs független köszén molekula, akkor a kötéstávolságok középértéke, a molekula formája, az amorf rész százaléka, stb. határozható meg statisztikus módszerekkel. Az 1. ábra bemutatja e módszer modern



1. ábra. A poliallilnaftalin számított és mért szórt intenzitásgörbéi

technikai eszközökkel és gondos kivitelezéssel elérhető pontosságát. A grafikon a PAN-ról szórt sugárzás intenzitása  $s$  függvényében. A kis keresztek a mért értékek, a pontok pedig a számított szerkezet szórásgörbét jelölik. Ehhez a kötéstávolságokat mindaddig változtatták, amíg a szórásgörbe a kísérletileg talált görbével megegyezett. Jobb egyezést nem is lehetne kívánni. Érdekes eredményeket ért el *Ruland* szénelegy részek esetében, ahol például kimutatta, hogy a köszén elegy rész molekulák közepes nagysága kb. három kondenzált aromás gyűrűnek felel meg.

Egy másik alkalmazási terület a polimerek kristályosságának a vizsgálata. Ezeket a vizsgálatokat régebben úgy végezték, hogy feltételezték, hogy a reflexiók tartalmazzák a kristályos rész szórt sugárzását, míg az alapfeketedés a nem-kristályos anyagból származik. A kristályos anyag százalékát egyenlővé tették a reflexiókban talált intenzitás és összintenzitás viszonyá-

val. Ez a kiértékelési módszer azonban túlzott egyszerűsítéseket tartalmaz, hisz a tiszta kristályos anyag is ad alapfeketedést. Ugyanis a kristály rács sohasem tökéletes: már az atomok hőmozgása is hozzájárul az alapfeketedéshez, de ezenkívül a rács hibák, amelyek még termodinamikai egyensúlyban is mindig jelen vannak, csökkentik a reflexiók intenzitását. Kétféle rács hiba ismeretes: az üres helyek, az interstitiális atomok, a diszlokációk mind olyan rács hibák, amelyek elhatárolha-



tók, tehát a hibás helyeken kívüli területen az elemi cellák bármilyen nagy távolságban fedésbe hozhatók, vagyis megőrzik a hosszútávú rendezettséget. A másik csoport, az úgynevezett parakristályos rácsrendezetlenség, amelynél a rendezetlenség két szomszédos elemi cella között kicsiny, de nagyobb távolságokban nagyobb értékeket vehet fel, tehát két egymástól távoli elemi cella translációval fedésbe nem hozható, vagyis a kristály ideális periodicitása megszűnik.

Ezért a kristályosság meghatározásának jobban megalapozott módszere az, amit *Ruland* nyomán a következőképpen foglalhatunk össze [4, 5]: Ismeretes, hogy

az egész reciprok térre integrált intenzitás  $\int I(\bar{s}) dv_s = 4\pi \int_0^\infty I(s) s^2 ds$ , ahol  $I(s)$  az

$I(\bar{s})$  függvény irány szerinti középértéke adott hosszúságú  $\bar{s}$  vektor esetén. Ha nincs szemcse-rendeződés,  $I(s)$  megfelel a mért intenzitásnak; szemcserendeződés esetén pedig ki kell számítani a fenti középértéket. Könnyű kimutatni, hogy így az előbbi

integrál értéke  $4\pi \int_0^\infty s^2 \langle f^2 \rangle ds$ , ahol  $\langle f^2 \rangle$  az atom szórási tényezők négyzeteinek közép-

értéke,  $\langle f^2 \rangle = \sum N_i f_i^2 / \sum N_i$ , ha  $N_i$  darab  $i$ -típusú atom van jelen. Ha ugyanezt az integrált nem az összintenzításra, hanem csak a kristályos reflexiók intenzitásaira írjuk fel, akkor

$$\int I_{cr}(\bar{s}) dv_s = 4\pi \int_0^\infty s^2 I_{cr}(s) ds = x_{cr} 4\pi \int_0^\infty s^2 \langle f^2 \rangle D ds,$$

ahol  $x_{cr}$  a kristályos anyagrészes viszonya a vizsgált mintában és  $D$  egy függvény, amely a rácsrendezetlenség mértékére és eloszlására jellemző (angolul: disorder function).  $D$  tehát a kristályos rész rendezetlenségének mértéke. Ha a rendezetlenség egyedüli oka a hőmozgás, úgy  $D$  azonos a jólismert Debye–Waller hőmérsékleti tényezővel,  $D = \exp(-Bs^2/2)$ . Kimutatható, hogy az előbb elsőnek említett rácshibák szintén egy exponenciális  $D$ -függvényt adnak; a parakristályos rendezetlenség  $D$ -függvénye is hasonló egy exponenciális függvényhez, így a teljes rendezetlenség  $D$  függvénye egy  $\exp(-ks^2)$  típusú függvénnyel jól megközelíthető. A fenti egyenletek szerint írhatjuk

$$x_{cr} = \frac{\int_0^\infty s^2 I_{cr}(s) ds}{\int_0^\infty s^2 \langle f^2 \rangle D ds} = \frac{\int_0^\infty s^2 I_{cr}(s) ds}{\int_0^\infty s^2 I(s) ds} \cdot \frac{\int_0^\infty s^2 \langle f^2 \rangle ds}{\int_0^\infty s^2 \langle f^2 \rangle D ds}.$$

Látható, hogy  $x_{cr}$  kiszámításához nemcsak minden  $s$  értékhez tartozó intenzitást kellene megmérni, hanem a  $D$  függvény ismeretére is szükség van. A gyakorlatban sem az előbbi, sem az utóbbi kívánság nem teljesíthető. Ezt a problémát *Ruland* kollégám a következőképpen oldotta meg. Tudjuk, hogy az intenzitásgörbe alakját az atomok atomtávolságai határozzák meg. Az intenzitásgörbe nagy maximumainak okozói a kis távolságok, amelyek a kötéstávolságoknak felelnek meg és ezek a távolságok az anyag kristályos és nem-kristályos részében azonosak. Ezért a fenti egyenletnek nemcsak a teljes reciprok térrész, hanem annak kisebb egységeiben is

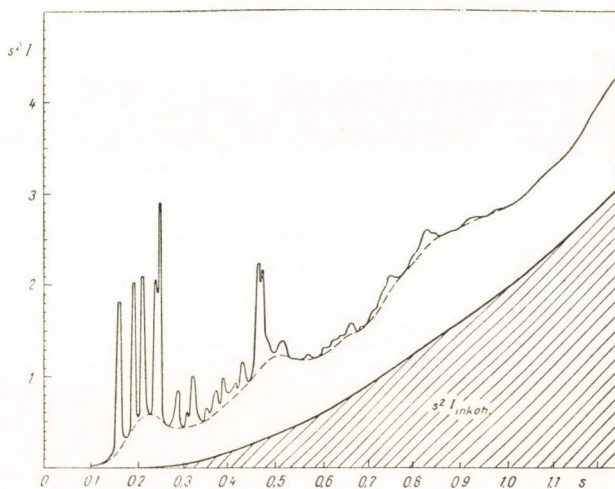
fenn kell állnia. Az integrálási határok, amelyek eredetileg nulla és végtelen voltak, megváltoztathatók. Az új  $s_1, s_2$  integrálási határok megválaszthatók úgy, hogy fenti egyenlet érvényben maradjon. A különböző  $k$  értékekhez tartozó  $D$ -függvényekkel az egyenlet jobb oldalán levő második tört értékei kiszámíthatók. Az lesz a helyes  $k$  érték, amellyel a kiszámított  $x_{cr}$  értékek függetlenek az integrálási határoktól. Az 1. táblázat az elmondottak alkalmazását mutatja be négy polipropilén

1. TÁBLÁZAT

Polipropilén minták kristályos súly frakciói,  $x_{cr}$ 

Integrálási határok	1. minta		2. minta		3. minta		4. minta	
	$k=0$	$k=4$	$k=0$	$k=4$	$k=0$	$k=4$	$k=0$	$k=4$
0,1–0,3	27,0	32,9	35,3	43,1	54,6	66,6	12,0	14,6
0,1–0,6	15,9	29,4	22,2	41,1	33,3	61,6	7,8	14,4
0,1–0,9	10,5	30,5	14,5	42,1	22,0	63,8	4,4	12,8
0,1–1,25	6,7	31,5	9,5	44,7	14,5	68,2	2,9	13,6
$\bar{x}_{cr}$	31		43		65		14	

esetében. A polipropilén minták különböző hőkezeléseken estek át. Látható, hogy a  $D$ -függvény nélkül, vagyis  $k=0$ ,  $x_{cr}$  értéke az integrálási határoktól függ, ellenben található egy olyan  $k$  érték, amelyikkel  $x_{cr}$  a választott határoktól függetlenné

2. ábra. Polipropilén  $s^2 I(s)$  görbéje (3. minta).

válík. Érdeemes megjegyezni, hogy mind a négy próba esetében ugyanazt a  $k$  értéket kaptuk,  $k=4$ . A hőmozgás okozta rácsrendezetlenség mind a négy próba esetében azonos, ellenben a hőkezeléssel okozott rács hibák mintáról-mintára változóak. Miután  $k$  konstans, el kell fogadnunk, hogy a hőkezeléssel bevitt rácsrendezetlen-



ségek elhanyagolhatóak a hőmozgáshoz viszonyítva. *Natta* és *Corradini* által más módszerekkel meghatározott Debye-hőmérsékleti tényező a mi mért  $k$ -értékünkkel azonosnak bizonyult. A 2. ábra az egyik polipropilén minta röntgenfelvételét mutatja, amelynél azonban az abszcisszára a mért  $\theta$  helyett  $s = 2 \sin \theta / \lambda$ , az ordinátára pedig  $s^2 I(s)$  van felmérve. Az alsó bevonalkázott terület az alapfeketedés incoherens része, vagyis a Compton sugárzás, amelyet természetesen számításunkból ki kell küszöbölni. A hullámvonal alatti terület képviseli az alapfeketedést és ezek fölött az anyag kristályos részéből származó kristályreflexiók vannak. Látható, hogy ez a kiértékelés különös gondosságot és nagy precizitást igényel, máskülönben az eredmények használhatatlannak válnak.

Hasonló vizsgálatokat végeztek intézetünkben különböző nylon minták esetében ([6]). Itt a rendezetlenség a minta előéletének függvénye. *Ruland* kollégám itt a rácshibák és a hőmozgásból származó  $k$  értékeket oly módon választja szét, hogy a mintát különböző hőmérsékleteken méri. A hőmozgás a hőmérséklet függvénye, míg a rácshibák, amelyek a minta előéletétől függenek, a hőmérséklettől függetlenek.

Intézetünkben végzett kutatások harmadik területe grafitszerkezetek vizsgálata ([7]), illetve szerves anyagok elszenesítésekor beálló változások szerkezetvizsgálata és az így keletkezett grafit tanulmányozása. Szerves anyagok pirolízisekor az illó anyagok eltávoznak és a vegyületnek többé-kevésbé tiszta szénből álló váza marad vissza. Szerencsés körülmények között ez a váz grafitos szerkezetűvé növekszik. E rácsformálás kezdetén a szerkezet különböző nagyságú parallel síkrácsok rendezetlen halmazának tekinthető, mint ahogy azt a 3. ábra mutatja. A rácssíkok kondenzált aromás gyűrűkből állnak. A síkrácsok ilyen halmaza egyrészt a lemezek közepes nagyságával, másrészt ezek egymástól mért közepes távolságával jellemezhető. A szerkezetek még pontosabb leírását adhatjuk, ha e két mért paraméter eloszlását a négyzetes hiba megadásával karakterizálhatjuk. Hogy a probléma komplex voltát bemutassuk, a 4. ábrában megrajzoltuk egy ilyen rácrendszer térbeli intenzitáseloszlását, vagyis az  $I-s$  diagrammot.

Egy végtelen vékonyágú sík Fourier-integrálja végtelen hosszúságú egyenes vonal; ha a síknak kétdimenziós belső szerkezete van, mint például a hexagonális grafit síknak, a Fourier-integrál számos parallel egyenes vonalból fog állani. Ha a síkok nem végtelen kiterjedésűek, a vonalak kiszélesednek. Végezetül is

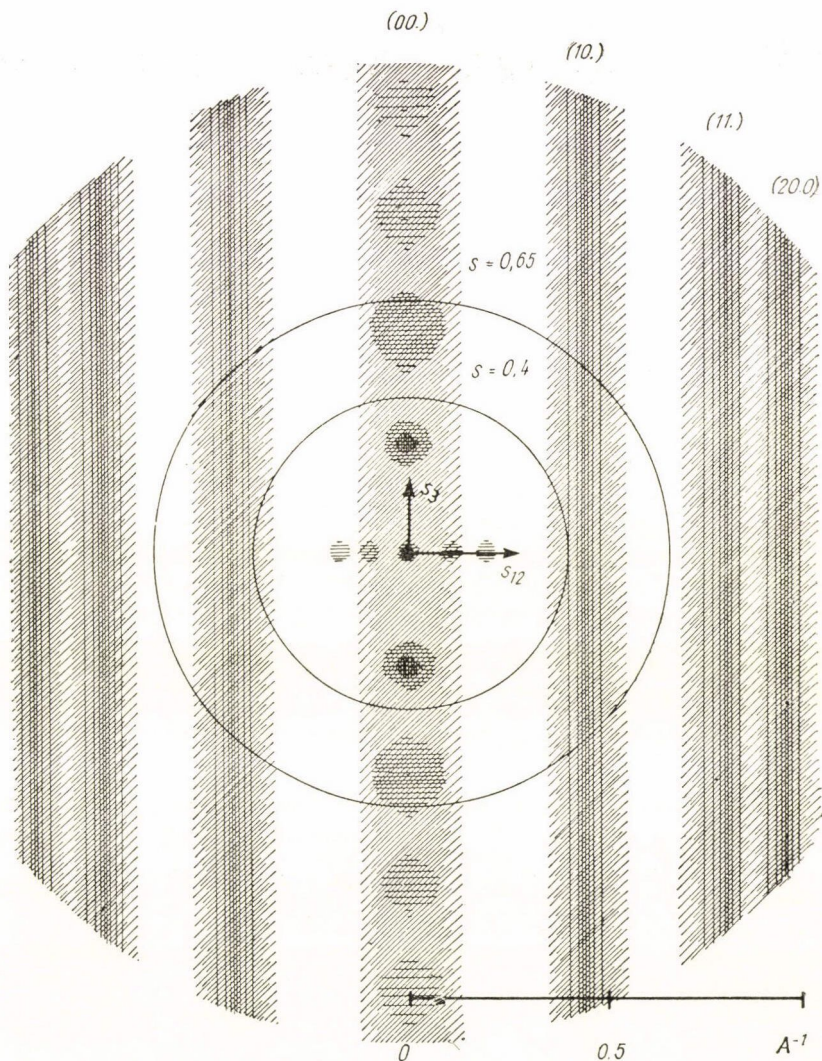
egy többé-kevésbé azonos távolságban fekvő párhuzamos síkköteg rendezetlen halmaza a középső vonal eddig egyenletes feketedését megzavarja. Egy meghatározott  $2\theta$  irányban mért intenzitás megfelel egy az ábrán a középponttól  $s$  távolságra fekvő pontokhoz tartozó intenzitások középértékének. Láthatjuk, hogy különböző  $s$  értékekhez a legkülönbözőbb intenzitás-eloszlások tartoznak. Ala-



3. ábra. Síkrácsok részben rendezett halmaza



csony  $s$  értékeknél, kb. 0,4 alatt, a középső vonal szélességét és szerkezetét mérhetjük ki, míg 0,4 fölött a szomszédos vonalak is megjelennek, és ezekből pedig, mint már említettem, a lemezek szerkezetét lehet levezetni. A *Ruland* kolléga által



4. ábra. Részben rendezett síkrácsok reciprok tere

kidolgozott értékelési módszer a következő paramétereket adja meg: a lemezkék közepes nagyságát, valamint a lemezkék egymástól mért távolságának középértékét, e mért távolságok négyzetes hibáját, azonkívül a lemezkék síkban mért közepes távolságát és az amorf rész százalékát. Ezek a mért értékek a grafitkristály



fejlődését remekül leírják és a pirolízis mechanizmusára vonatkozólag *Ruland* kollégám számos következtetést tudott ezekből levonni.

Egy másik alkalmazási lehetőség a rhomboédes grafitok vizsgálata ([8]). Ismeretes, hogy a rétegrácsok síkjainak egymáshoz viszonyított elrendezése *ABABAB* vagy *ABCABC* szerkezetű lehet. A hexagonális grafit *ABAB* pozíciójú síkjainak normál menetét egy vagy több *C* pozíciójú sík zavarhatja. Könnyen felírható egy  $\varrho(\bar{r})$  függvény, amely a síkok szerkezetén kívül a síkok egymáshoz való viszonyát is leírja. Ebben a függvényben egy  $\alpha$  eloszlás fejezi ki a hibás, rhomboedrikus síkok valószínűségét. E függvény autokorrelációs formájából és annak Fourier-integráljából az intenzitás-eloszlás felírható, amely a gyakorlati mérésekkel összehasonlítva az  $\alpha$  számszerű értéket szolgáltathatja. *Ruland* kollégám így számos szintetikus grafitmintán tanulmányozta a fentebb említett paramétereket; azt találta, hogy amíg a lemezek egymástól mért távolsága nagyobb, mint  $3,38 \text{ \AA}$ , a valószínűség hexagonális vagy rhomboédes növekedésre egyforma, vagyis 50–50 százalék; amikor a távolságok csökkennek, a hexagonális rész valószínűsége gyorsan megnövekedik, de még a 3000 foknál grafitizált mintákban is található egy bizonyos százalék rhomboédes elhelyezés.

\*

Azt hiszem, itt az ideje annak, hogy előadásomat befejezzem. Előadásom célja az lett volna, hogy az utolsó évek fejlődését elméleti téren bemutassam, s néhány példával illusztráljam. A gyakorlati eredmények bemutatásakor főleg intézetünkben végzett munkákból választottam, mivel ezeket az eredményeket ismerem a legjobban. Ha a hallgatóság úgy találná, hogy a problémák elméleti oldalát túlzottan hangsúlyoztam, úgy kérem ezért elnézésüket, de őszintén megvallva, ez az oldal engem jobban érdekel.

Még egyszer szeretném kifejezni köszönetemet a Magyar Tudományos Akadémia felé, amely látogatásomat és előadásomat lehetővé tette.

Szeretnék köszönetet mondani *dr. W. Ruland* kollégámnak nemcsak a gyakori eszmecseréért, hanem segítségéért is az előadás előkészítésénél.

## IRODALOM

- [1] *R. Hosemann, S. N. Bagchi*: Direct Analysis of Diffraction by Matter, Amsterdam, 1962.
- [2] *L. Schwarz*: Théorie des Distributions, Série Actualités Scientifiques, Paris, 1950.  
*J. Arsac*: Transformation de Fourier et Théorie des Distributions, Paris, 1961.  
*M. J. Lighthill*, Introduction to Fourier Analysis and Generalised Functions, Cambridge University Press, 1959.
- [3] *W. Ruland*, Acta Cryst. 12, 679, 1959.
- [4] *W. Ruland*, Acta Cryst. 14, 1180, 1961.
- [5] *W. Ruland*, Faserforschung und Textiltechnik 15, 533, 1964.
- [6] *W. Ruland*, Polymer 5, 89, 1964.
- [7] *W. Ruland*, Carbon. 2, 365, 1965.
- [8] *W. Ruland*, Acta Cryst. 18, 992, 1965.





# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A KVANTUMMECHANIKÁRÓL I.\*

M. BORN és P. JORDAN

A *Heisenberg*től nemrég megadott alapfeltevésekből kiindulva kiépítjük a kvantummechanika rendszeres elméletét (egyelőre egy szabadsági fokú rendszerek esetére). Matematikai segédeszközünk a mátrixszámítás. Miután ezt bemutattuk, a mechanikai mozgásegyenleteket variációs elvből származtatjuk le, majd bebizonyítjuk, hogy *Heisenberg* kvantumfeltétele alapján az energiatétel és *Bohr* frekvenciafeltétele következik a mechanikai egyenletekből. A harmonikus oszcillátor példáján megvilágítjuk a megoldás egyértelműségének kérdését és a parciális rezgések fázisának jelentését. Végezetül megkíséreljük, hogy az elektromágneses tér törvényeit beleillesszük az új elméletbe.

### Bevezetés

A feltevések, melyeket *Heisenberg*<sup>1</sup> egy új, a kvantumelmélet alapvető követelményeinek megfelelő kinematika és mechanika megalapozására nemrég közzétett, nagy horderejűeknek látszanak számunkra. *Heisenberg* arra tesz kísérletet, hogy az új tényekről — a régi, megszokott fogalmak többé-kevésbé mesterkélt és erőltetett módosítása helyett — valóban új, alkalmas fogalomrendszer megalkotása útján adjon számot. *Heisenberg* a fizikai gondolatokat, melyek őt eközben vezérelték, oly világosan mondta ki, hogy minden kiegészítő megjegyzés feleslegesnek látszik. Formális, matematikai szempontból tekintve azonban megfontolásai — amint azt ő maga is hangsúlyozza — még csak kezdeti stádiumban vannak. Feltevéseit csupán egyszerű példákon világította meg, s nem épített ki egy általános elméletet. Kihasználva a kedvező körülményt, hogy megfontolásait már *in statu nascendi* megismerhettük, vizsgálatainak lezárta követően arra törekedtünk, hogy tisztázzuk feltevéseinek formális matematikai tartalmát. Itt bemutatunk néhányat eredményeink közül. Ezek azt mutatják, hogy a *Heisenberg*től megadott alapokra valóban felépíthető a kvantummechanika zárt matematikai elméletének épülete, figyelemre méltóan szoros analógiában a klasszikus mechanikával, mindazonáltal megőrizve a kvantumjelenségekre jellemző vonásokat.

Itt egyelőre — *Heisenberg*gel együtt — az egy szabadsági fokú rendszerekre szorítkozunk, melyekről feltesszük, hogy — klasszikusan szólva — *periodikusak*. A matematikai elmélet általánosításával tetszőleges számú szabadsági fokra, valamint aperiodikus mozgásokra e dolgozat folytatásában foglalkozunk. *Heisenberg* megfontolásait lényegesen általánosítva, a tárgyalást nem korlátozzuk a nem-relativisztikus mechanikára, sem pedig a Descartes-koordinátákkal végzett számításokra. Az egyetlen korlátozás, melyet a koordinátákat illetően kirovunk, abban áll, hogy megfontolásaink *librációs koordinátákra* vonatkoznak, melyek a klasszikus elméletben *periodikus* függvényei az időnek. Némely esetben mindenesetre kézenfekvőnek

\* ZS. f. Phys. 34, 858, 1925.

látszik más koordináták használata, pl. a rotátor esetében az elfordulás  $\varphi$  szögéé, mely lineáris függvénye az időnek. Így járt el *Heisenberg* is a rotátor általa megadott tárgyalásában; mindazonáltal nyitva kell hagynunk a kérdést, vajon az ott követett eljárás megindokolható-e, ha a következő kvantummechanikai álláspontot foglaljuk el.

*Heisenberg* megfontolásainak matematikai alapja a kvantumelméleti mennyiségek szorzási törvénye, melyet ő szellemes korrespondencia-megfontolás útján fedezett fel. *Heisenberg* formalizmusának dolgozatunkban megadott kidolgozása azon az észrevételen alapszik, hogy ez a szabály nem más, mint a *mátrixok szorzásának* a matematikusok előtt jól ismert törvénye. Valamely fizikai mennyiséget — melyet a klasszikus mechanikában az idő függvényeként adunk meg — a kvantummechanikában egy mindkét oldala mentén végtelen, kvadratikusszámú *mátrix* reprezentál. (A mátrix indexei lehetnek diszkrét vagy folytonosan változók.) Az új kvantummechanika matematikai módszerét ennek folytán az jellemzi, hogy a szokásos szám-analízis helyett *mátrix-analízist* használ.

Ezzel a módszerrel megkíséreltük itt megragadni a mechanika és az elektrodinamika legegyszerűbb kérdéseit. Egy *variációs elv*, melyet korrespondencia-megfontolás tesz kézenfekvővé, a legáltalánosabb Hamilton-függvény mellett a klasszikus kanonikus egyenletekkel a legszorosabb analógiában álló *mozgásegyenleteket* szolgáltat. A kvantumfeltétel, összekapcsolva egy a mozgásegyenletekből következő összefüggéssel, egyszerű mátrix-írásmódot tesz lehetővé. Ennek segítségével sikerül igazolni az *energiatétel* általános érvényét és a Bohr-féle frekvenciafeltételt a *Heisenberg*-től megsejtett értelemben. Ezek igazolását *Heisenberg* az általa tárgyalt egyszerű esetekben sem tudta teljesen véghezvinni. Ezen példák egyikére részletesebben visszatérünk majd, hogy tájékozódást nyerjünk a parciális rezgések fázisának az új elméletben betöltött szerepéről. Végezetül megmutatjuk, hogy az elektromágneses tér vákuumban érvényes alaptörvényei természetes módon illeszkednek be az új módszer keretei közé, és megalapozzuk *Heisenberg* feltevését, mely szerint valamely atom elektromos momentumát reprezentáló mátrix elemeinek abszolútérték-négyzete mértéke az átmeneti valószínűségnek.

### I. fejezet. Mátrixszámítás

1. §. *Elemi műveletek. Függvények.* Végtelen négyzetes mátrixokkal<sup>2</sup> számolunk, melyeket itt vastag betűkkel kívánunk jelölni, míg a megszokott vékony betűk mindenkor közönséges számokat jelölnek:

$$\mathbf{a} = (a(nm)) = \begin{pmatrix} a(00) & a(01) & a(02) & \dots \\ a(10) & a(11) & a(12) & \dots \\ a(20) & a(21) & a(22) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Két mátrix egyenlősége a megfelelő komponensek egyenlőségét jelenti:

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad \text{a. m.} \quad a(nm) = b(nm). \quad (1)$$



A mátrixok összeadása a definíció szerint a megfelelő komponensek összeadását jelenti:

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} + \mathbf{c} \quad \text{a. m.} \quad a(nm) = b(nm) + c(nm). \quad (2)$$

A szorzást a determináns-elméletből ismert „sorszor oszlop” szabály definiálja:

$$\mathbf{a} = \mathbf{bc} \quad \text{a. m.} \quad a(nm) = \sum_{k=0}^{\infty} b(nk)c(km). \quad (3)$$

A hatványok ismételt szorzással definiálhatók. A szorzásra fennáll az asszociatív, a szorzás és az összeadás összekapcsolására pedig a disztributív törvény:

$$(\mathbf{ab})\mathbf{c} = \mathbf{a}(\mathbf{bc}); \quad (4)$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \mathbf{ab} + \mathbf{ac}. \quad (5)$$

Nem érvényes ezzel szemben a szorzásra a kommutatív törvény: az  $\mathbf{ab} = \mathbf{ba}$  egyenlet általában *nem* helytálló. Ha az mégis fennáll,  $\mathbf{a}$  és  $\mathbf{b}$  *felcserélhető*ek.

Az

$$\mathbf{I} = (\delta_{nm}), \quad \begin{cases} \delta_{nm} = 0, & \text{ha } n \neq m, \\ \delta_{nn} = 1 \end{cases} \quad (6)$$

képlettel definiált *egység mátrix* az

$$\mathbf{aI} = \mathbf{Ia} = \mathbf{a} \quad (6a)$$

tulajdonsággal rendelkezik.

Az  $\mathbf{a}$  mátrix *reciprokát*, az  $\mathbf{a}^{-1}$  mátrixot<sup>3</sup>

$$\mathbf{a}^{-1}\mathbf{a} = \mathbf{aa}^{-1} = \mathbf{I} \quad (7)$$

definiálja.

Valamely  $\mathbf{a}$  mátrix „középérték”-ének azt az  $\bar{\mathbf{a}}$  mátrixot nevezzük, melynek átlós elemei megegyeznek  $\mathbf{a}$  átlós elemeivel, valamennyi más eleme pedig zérus:

$$\bar{\mathbf{a}} = (\delta_{nm}a(nm)). \quad (8)$$

Ezen átlós elemek összegét az  $\mathbf{a}$  mátrix „átlósösszeg”-ének nevezzük és  $D(\mathbf{a})$ -val jelöljük:

$$D(\mathbf{a}) = \sum_n a(nn). \quad (9)$$

A (3) összefüggés alapján könnyen igazolható: ha az  $\mathbf{y} = \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_m$  szorzat átlósösszege véges, úgy ezen átlósösszeg értéke változatlan marad, ha a tényezőket ciklikus felcserélésnek vetjük alá:

$$D(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_m) = D(\mathbf{x}_r\mathbf{x}_{r+1}\ldots\mathbf{x}_m\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_{r-1}). \quad (10)$$

Nyilvánvalóan elegendő a tétel helyességéről két tényező esetében meggyőződni.

Ha az  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  mátrixok komponensei valamely  $t$  paraméter függvényei, úgy írható:

$$\frac{d}{dt} \sum_k a(nk)b(km) = \sum_k \{\dot{a}(nk)b(km) + a(nk)\dot{b}(km)\},$$





Szavakba foglalva így hangzik ez a szabály: Gondoljuk el, hogy az adott szorzatban minden tényezőt *egyenként* kiírunk (tehát pl. nem  $x_1^3 x_2^2$ -t írunk, hanem  $x_1 x_1 x_1 x_2 x_2$ -t); ragadjuk ki valamelyik  $x_k$  tényezőt és képezzük valamennyi azt követő s valamennyi azt megelőző tényező szorzatát (ebben a sorrendben). Az összes így képezett tag összege a szorzatnak a megadott  $x_k$  szerint képezett differenciáhányadosa.

Szemléltesse az eljárást a következő néhány példa:

$$y = x^n, \quad \frac{dy}{dx} = nx^{n-1},$$

$$y = x_1^n x_2^m, \quad \frac{dy}{dx_1} = x_1^{n-1} x_2^m + x_1^{n-2} x_2^m x_1 + \dots + x_2^m x_1^{n-1},$$

$$y = x_1^2 x_2 x_1 x_3, \quad \frac{dy}{dx_1} = x_1 x_2 x_1 x_3 + x_2 x_1 x_3 x_1 + x_3 x_1^2 x_2.$$

Ha megköveteljük továbbá

$$\frac{\partial(y_1 + y_2)}{\partial x_k} = \frac{\partial y_1}{\partial x_k} + \frac{\partial y_2}{\partial x_k} \quad (15)$$

fennállását, úgy ezzel a  $\frac{\partial y}{\partial x}$  deriváltat definiáltuk a legáltalánosabb  $y$  analitikus függvényekre.

Ezen definíciók és az átlósösszeg (9) meghatározása alapján fennáll a

$$\frac{\partial D(y)}{\partial x_k(nm)} = \frac{\partial y}{\partial x_k}(mn) \quad (16)$$

összefüggés, ahol a jobb oldalon a  $\frac{\partial y}{\partial x_k}$  mátrix  $mn$  komponense áll. Ez az összefüggés is használható a  $\frac{\partial y}{\partial x_k}$  derivált definíciójaként. A (16) összefüggés igazolása céljából nyilvánvalóan elegendő egy (13) alakú függvényt szemügyre venni. A (14) és (3) képletek felhasználásával írható:

$$\frac{\partial y}{\partial x_k}(mn) = \sum_{r=1}^s \delta_{l,r,k} \sum_{\tau} \prod_{p=r+1}^s x_{l_p}(\tau_p \tau_{p+1}) \prod_{p=1}^{r-1} x_{l_p}(\tau_p \tau_{p+1}); \quad (17)$$

$$\tau_{r+1} = m, \quad \tau_{s+1} = \tau_1, \quad \tau_r = m.$$

Másrésről (3)-ból és (9)-ből kapjuk:

$$\frac{\partial D(y)}{\partial x_k(mn)} = \sum_{r=1}^s \delta_{l,r,k} \sum_{\tau} \prod_{p=1}^{r-1} x_{l_p}(\tau_p \tau_{p+1}) \prod_{p=r+1}^s x_{l_p}(\tau_p \tau_{p+1}); \quad (17')$$

$$\tau_1 = \tau_{s+1}, \quad \tau_r = n, \quad \tau_{r+1} = m.$$

A (17), (17') képletek összehasonlítása a (16) eredményt adja.

Emeljünk ki itt azonnal egy, a következők szempontjából fontos tényt, melyet a (14) definícióból lehet leolvasni: *Valamely szorzat parciális deriváltjai invariánsak a tényezők ciklikus felcseréléseivel szemben.* A (16) összefüggés fennállása folytán ez a tétel (10)-ből is megkapható.

Ezen előkészületek befejezésekképpen szenteljünk még néhány szót két változó  $g(pq)$  függvényeinek. Ha

$$y = p^s q^r, \quad (18)$$

(14) szerint kapjuk:

$$\frac{\partial y}{\partial p} = \sum_{l=1}^{s-1} p^{s-1-l} q^r p^l, \quad \frac{\partial y}{\partial q} = \sum_{j=1}^{r-1} q^{r-1-j} p^s q^j. \quad (18')$$

A legáltalánosabb vizsgálandó függvény az 1. § szerint

$$z = \prod_{j=1}^k (p^{s_j} q^{r_j}) \quad (19)$$

alakú tagok lineáris kifejezése alakjában állítható elő.

A

$$P_l = \prod_{j=l+1}^k (p^{s_j} q^{r_j}) \prod_{j=1}^{l-1} (p^{s_j} q^{r_j}) \quad (20)$$

rövidítést alkalmazva, a deriváltak így írhatók:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial z}{\partial p} &= \sum_{l=1}^k \sum_{m=0}^{s_l-1} p^{s_l-1-m} q^{r_l} P_l p^m, \\ \frac{\partial z}{\partial q} &= \sum_{l=1}^k \sum_{m=0}^{r_l-1} q^{r_l-1-m} P_l p^{s_l} q^m. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Ezekből az egyenletekből fontos következtetés vonható le. Vegyük szemügyre a

$$d_1 = q \frac{\partial z}{\partial q} - \frac{\partial z}{\partial q} q, \quad d_2 = p \frac{\partial z}{\partial p} - \frac{\partial z}{\partial p} p \quad (22)$$

mátrixokat.

A (21) összefüggések felhasználásával kapjuk:

$$d_1 = \sum_{l=1}^k (q^{r_l} P_l p^{s_l} - P_l p^{s_l} q^{r_l}),$$

$$d_2 = \sum_{l=1}^k (p^{s_l} q^{r_l} P_l - q^{r_l} P_l p^{s_l}).$$

Innen következik:

$$d_1 + d_2 = \sum_{l=1}^k (p^{s_l} q^{r_l} P_l - P_l p^{s_l} q^{r_l}).$$



Itt a szumma-jel alatt álló kifejezés második tagja az  $l$  következő értékéhez tartozó összeadandó első tagjával együtt zérust ad, és a teljes összeg első tagja és utolsó tagja is megsemmisítik egymást.

Kapjuk tehát:

$$\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 = 0.$$

Ez az összefüggés, minthogy  $\mathbf{z}$ -ben lineáris, nemcsak a (19) alakú  $\mathbf{z}$  kifejezésekre érvényes, hanem egyszersmind tetszőleges  $\mathbf{g}(\mathbf{pq})$  analitikus függvényre is.<sup>4</sup>

A mátrixanalízis ezen rövid áttekintésének befejezésekképpen még bizonyítsuk be a tételt: *Minden*

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r) = 0$$

*mátrixegyenlet helyes marad, ha az  $\mathbf{x}_j$  argumentum-mátrixok mindegyikében minden sorra és minden oszlopra ugyanazt a permutációt alkalmazzuk.* Ehhez nyilván elegendő megmutatni, hogy az  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  mátrixokra, melyek ezen operáció eredményeképpen az  $\mathbf{a}', \mathbf{b}'$  mátrixokba mennek át, teljesül az

$$\mathbf{a}' + \mathbf{b}' = (\mathbf{a} + \mathbf{b})'$$

és az

$$\mathbf{a}'\mathbf{b}' = (\mathbf{a}\mathbf{b})'$$

invariancia, ahol a jobb oldalon az  $\mathbf{a} + \mathbf{b}$ -ből, illetve az  $\mathbf{a}\mathbf{b}$ -ből a mondott permutáció eredményeképp előállított mátrixok állnak.

A bizonyítást oly módon végezzük el, hogy a permutáció alkalmazását alkalmas mátrixszal való szorzással helyettesítjük.<sup>5</sup>

Valamely permutációt a

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & \dots \\ k_0 & k_1 & k_2 & k_3 & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n \\ k_n \end{pmatrix}$$

alakban írunk fel.

Ehhez a permutációhoz rendeljük hozzá a

$$\mathbf{p} = (p(nm)), \quad p(nm) = \begin{cases} 1, & \text{ha } m = k_n, \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

permutációs mátrixot. A  $\mathbf{p}$  mátrix transzponáltja:

$$\tilde{\mathbf{p}} = (\tilde{p}(nm)), \quad \tilde{p}(nm) = \begin{cases} 1, & \text{ha } n = k_m, \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

E két mátrixot összeszorozva kapjuk:

$$\mathbf{p}\tilde{\mathbf{p}} = \left( \sum_k p(nk)\tilde{p}(km) \right) = (\delta_{nm}) = \mathbf{1},$$

minthogy a  $p(nk), \tilde{p}(km)$  tényezők mindketten csak akkor különböznek zérustól, ha  $k = k_n = k_m$ , azaz  $n = m$ . Eszerint  $\tilde{\mathbf{p}}$  reciproka  $\mathbf{p}$ -nek:

$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^{-1}.$$

Legyen most  $\mathbf{a}$  tetszőleges mátrix; ekkor

$$\mathbf{p}\mathbf{a} = \left( \sum_k p(nk)a(km) \right) = (a(k_n m))$$

az a mátrix, mely  $\mathbf{a}$ -ból az  $\begin{pmatrix} n \\ k_n \end{pmatrix}$  permutációnak a sorokra való alkalmazása útján áll elő, s hasonlóképpen

$$\mathbf{ap}^{-1} = \left( \sum_k a(nk) \tilde{p}(km) \right) = (a(nk_m))$$

az oszlopok permutálásával nyert mátrix. Ugyanazt a permutációt alkalmazva a sorokra s az oszlopokra, az

$$\mathbf{a}' = \mathbf{pap}^{-1}$$

mátrix adódik.

Innen minden további nélkül következik:

$$\mathbf{a}' + \mathbf{b}' = \mathbf{p}(\mathbf{a} + \mathbf{b})\mathbf{p}^{-1} = (\mathbf{a} + \mathbf{b})',$$

$$\mathbf{a}'\mathbf{b}' = \mathbf{pabp}^{-1} = (\mathbf{ab})'.$$

Látható tehát, hogy mátrixegyenletek segítségével az elemek valamiféle sorrendje vagy rangsora sohasem határozható meg.

Egyébiránt nyilvánvaló, hogy igaz a sokkal általánosabb tétel, mely szerint minden mátrixegyenlet invariáns az

$$\mathbf{a}' = \mathbf{bab}^{-1}$$

alakú transzformációkkal szemben, ahol  $\mathbf{b}$  tetszőleges mátrixot jelent. Később természetesen látni fogjuk, hogy ez mátrix-differenciálegyenletekre már nem igaz minden további nélkül.

## 2. fejezet. Dinamika

3. §. Az alaptörvények. A dinamikai rendszer leírására a  $\mathbf{q}$  koordináta és a  $\mathbf{p}$  impulzus szolgál. Legyen

$$\mathbf{q} = (q(nm)e^{2\pi i v(nm)t}), \quad \mathbf{p} = (p(nm)e^{2\pi i v(nm)t}). \quad (24)$$

Itt  $v(nm)$  a kvantumelméleti frekvenciákat jelenti, melyek az  $n, m$  kvantumszámokkal jellemzett állapotok között végbemenő átmenetekhez tartoznak. A (24) mátrixok legyenek *hermitikusak*, azaz a mátrixok transzponálásakor minden komponens a komplex-konjugáltjába menjen át, s ez teljesüljön minden valós  $t$ -re. Írható tehát:

$$q(nm)q(mn) = |q(nm)|^2 \quad (25)$$

és

$$v(nm) = -v(mn). \quad (26)$$

Ha  $\mathbf{q}$  Descartes-koordinátát jelöl, úgy a (25) mennyiség az  $n \rightleftharpoons m$  átmenetek valószínűségének<sup>6</sup> mértéke.

Megköveteljük továbbá, hogy

$$v(jk) + v(kl) + v(lj) = 0 \quad (27)$$



legyen. A (26), (27) összefüggések tartalma így is kifejezhető: Léteznek olyan  $W_n$  mennyiségek, hogy fennáll

$$h\nu(nm) = W_n - W_m. \quad (28)$$

Ebből (2) és (3) folytán következik, hogy valamely  $\mathbf{g}(\mathbf{pq})$  függvény mindenkor ismét a

$$\mathbf{g} = (g(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}) \quad (29)$$

alakú; itt a  $(g(nm))$  mátrix ugyanazon eljárással nyerhető a  $(q(nm))$ ,  $(p(nm))$  mátrixokból, amellyel  $\mathbf{g}$  a  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{q}$  mátrixokból előállt. Ezért a mostantól fogva mellőzendő (24) írásmód helyett választhatjuk a rövidebb

$$\mathbf{q} = (q(nm)), \quad \mathbf{p} = (p(nm)) \quad (30)$$

írásmódot.

A  $\mathbf{g} = (g(nm))$  mátrix idő szerint képezett deriváltjára kapjuk, visszaemlékezve még egyszer a (24), ill. (29) írásmódra:

$$\dot{\mathbf{g}} = 2\pi i(\nu(nm)g(nm)). \quad (31)$$

Ha — amint azt fel fogjuk venni — az  $n \neq m$  esetben  $\nu(nm) \neq 0$ , úgy  $\dot{\mathbf{g}} = 0$  azt jelenti, hogy  $\mathbf{g}$  átlós mátrix:  $g(nm) = \delta_{nm}g(nn)$ .

Valamely  $\dot{\mathbf{g}} = \mathbf{a}$  differenciálegyenlet invariáns azon átalakítással szemben, amely abban áll, hogy valamennyi mátrix sorait és oszlopait, valamint a  $W_n$  számokat ugyanazon permutációnak vetjük alá. Abból a célból, hogy ezt belássuk, vegyük szemügyre a

$$\mathbf{W} = (\delta_{nm}W_n)$$

átlós mátrixot; ekkor

$$\mathbf{W}\mathbf{g} = \left(\sum_k \delta_{nk} W_n g(km)\right) = (W_n g(nm)),$$

$$\mathbf{g}\mathbf{W} = \left(\sum_k g(nk) \delta_{km} W_k\right) = (W_m g(nm)),$$

tehát (31) szerint

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{2\pi i}{h}((W_n - W_m)g(nm)) = \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{W}\mathbf{g} - \mathbf{g}\mathbf{W}).$$

Ha  $\mathbf{p}$  permutációs mátrixot jelöl, úgy a

$$\mathbf{W}' = \mathbf{p}\mathbf{W}\mathbf{p}^{-1} = (\delta_{nkm} W_{nk})$$

transzformált az az átlós mátrix, amelynek átlós elemei a permutált  $W_n$ -ek. Kapjuk tehát:

$$\mathbf{p}\dot{\mathbf{g}}\mathbf{p}^{-1} = \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{W}'\mathbf{g}' - \mathbf{g}'\mathbf{W}') = \dot{\mathbf{g}}',$$

ahol  $\mathbf{g}' = \mathbf{p}\mathbf{g}\mathbf{p}^{-1}$  és  $\dot{\mathbf{g}}'$  a  $\mathbf{g}'$  mátrixnak a (31) szabály szerint a permutált  $W_n$ -ekkel képezett időderiváltja.

A  $\dot{\mathbf{g}}$  mátrix sorai és oszlopai tehát ugyanúgy permutálódnak, mint  $\mathbf{g}$  sorai és oszlopai, s ebből következik állításunk.

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy tetszőleges  $\mathbf{a}' = \mathbf{b}\mathbf{a}\mathbf{b}^{-1}$  alakú transzformációra nem érvényes hasonló tétel; ekkor ugyanis  $\mathbf{W}'$  többé nem átlós mátrix. E nehézség ellenére ezen általánosabb transzformációk beható tanulmányozása elengedhetetlennek látszik számunkra; remélhető ugyanis, hogy ilyen módon bepillantást nyerünk az új elmélet mélyebb összefüggéseibe. Erre a későbbiekben még visszatérünk.<sup>7</sup>

A

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + \mathbf{U}(\mathbf{q})$$

alakú *Hamilton-függvény* esetében *Heisenberggel* együtt feltesszük, hogy a *mozgásegyenletek* ugyanolyan alakúak, mint a klasszikus elméletben. A 2. §-ban bevezetett szimbolika segítségével írható tehát:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m} \mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{q}}. \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Kísérjük meg most általánosságban korrespondencia-megfontolás útján meghatározni a tetszőleges  $\mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q})$  Hamilton-függvényhez tartozó mozgásegyenleteket. Ezt meg kell tennünk, tekintettel a relativisztikus mechanikára és különösképpen a mágneses terek hatásának kitett elektronok mozgásának tárgyalására. Az utóbbi esetben  $\mathbf{H}$  Descartes-koordináták használata mellett nem állítható elő mint két függvény összege, melyek egyike csak az impulzusoktól, másika pedig csak a koordinátáktól függ.

A klasszikus elméletben a mozgásegyenletek levezethetők az

$$\int_{t_0}^{t_1} L dt = \int_{t_0}^{t_1} \{p\dot{q} - H(pq)\} dt = \text{extremum} \quad (33)$$

hatáselvből.

Gondoljuk el, hogy ide behelyettesítettük  $L$  Fourier-kifejezését, és válasszuk a  $t_1 - t_0$  időközt elég nagynak; ekkor csak  $L$  konstans tagja fog az integrálhoz járulékot szolgáltatni. Az így adódó alak kézenfekvővé teszi, hogy a hatáselvet a következőképpen vigyük át a kvantummechanikába:

A  $D(\mathbf{L}) = \sum_k L(kk)$  átlósösszeget kell szélsőértékké tennünk:

$$D(\mathbf{L}) = D(\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q})) = \text{extremum}, \quad (34)$$

mégpedig  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{q}$  alkalmas választásával, rögzített  $v(nm)$  mellett.

A  $D(\mathbf{L})$  átlósösszegnek  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{q}$  elemei szerint képezett deriváltjait zérussal egyenlővé téve kapjuk a

$$2\pi i v(nm) q(nm) = \frac{\partial D(\mathbf{H})}{\partial p(mn)},$$

$$2\pi i v(mn) p(mn) = \frac{\partial D(\mathbf{H})}{\partial q(mn)}$$

mozgásegyenleteket.



A (26), (31) és (16) képletek alapján látható, hogy ezek a mozgásegyenletek általánosságban a

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

kanonikus alakba írhatók.

Kvantumfeltételként Heisenberg egy Thomastól<sup>8</sup> és Kuhntól<sup>9</sup> felállított összefüggést használ. A „klasszikus” kvantumelmélet

$$J = \oint p dq = \int_0^{1/v} p \dot{q} dt$$

egyenlete  $p$  és  $q$

$$p = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} p_{\tau} e^{2\pi i v \tau}, \quad q = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} q_{\tau} e^{2\pi i v \tau}$$

Fourier-kifejtéseinek felhasználásával az

$$1 = 2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial}{\partial J} (q_{\tau} p_{-\tau}) \quad (36)$$

alakra hozható.

Ha itt  $p = m\dot{q}$  úgy a  $p_{\tau}$  együtthatók kifejezhetők a  $q_{\tau}$  együtthatókkal, és megkapjuk azt a klasszikus egyenletet, melynek a korrespondencia-elv szellemében elvégzett átalakítása differenciaegyenletté Thomas és Kuhn összefüggését adja. Mint-hogy itt nem akarjuk a  $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$  feltevést tenni, a (36) egyenletet közvetlenül kell differenciaegyenlet-nyelvre lefordítanunk.

Feleljen meg a

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial}{\partial J} (q_{\tau} p_{-\tau})$$

mennyiségnek

$$\frac{1}{h} \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} (q(n+\tau, n)p(n, n+\tau) - q(n, n-\tau)p(n-\tau, n));$$

itt a jobb oldalon azokat a  $q(nm)$ -eket és  $p(nm)$ -eket, amelyek negatív indexet kapnak, zérussal kell egyenlővé tenni. Ily módon (36)-ot a korrespondencia-elvnek megfelelően átalakítva nyerjük a

$$\sum_k (p(nk)q(kn) - q(nk)p(kn)) = \frac{h}{2\pi i} \quad (37)$$

kvantumfeltételt.

Végtelen sok egyenletet kaptunk, ti. minden  $n$ -re egyet.

Speciálisan a  $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$  esetben kapjuk:

$$\sum_k v(kn) |q(nk)|^2 = \frac{h}{8\pi^2 m},$$

ami — mint az könnyen megállapítható — megegyezik a kvantumfeltétel Heisenberg-féle alakjával, ill. a Thomas—Kuhn-féle egyenlettel. A (37) kvantumfeltételt ezen egyenlet megfelelő általánosításának kell tekintenünk.

A (37) egyenletből látható egyébként, hogy a  $D(\mathbf{pq})$  átlósösszeg szükségképpen végtelenné válik. Ha nem így volna, (10)-ből  $D(\mathbf{pq}) - D(\mathbf{qp}) = 0$  következne, míg (37) a  $D(\mathbf{pq}) - D(\mathbf{qp}) = \infty$  eredményre vezet. A megfontolásainkban szereplő mátrixok tehát sohasem végesek.<sup>10</sup>

4. §. *Következmények. Energia- és frekvenciatétel.* Az előző §-ban felállított összefüggések maradéktalanul megadják az új mechanika alaptörvényeit. A kvantummechanika minden egyéb törvényét, melynek általános érvényt tulajdonítunk, ezekből kiindulva *be kell bizonyítanunk*. Ilyen bebizonyítandó törvényként első sorban az *energiatétel* és a *Bohr-féle frekvenciafeltétel* jön tekintetbe. Az energiatétel azt mondja ki, hogy ha  $\mathbf{H}$  az energia, úgy  $\dot{\mathbf{H}} = 0$ , vagy hogy  $\mathbf{H}$  átlós mátrix. Ekkor  $\mathbf{H}$  átlós komponenseit, a  $H(nn)$ -eket Heisenberg nyomán a rendszer *különböző állapotainak energiáiként* értelmezzük. A Bohr-féle frekvenciafeltétel követelése szerint

$$h\nu(nm) = H(nn) - H(mm),$$

vagy

$$W_n = H(nn) + \text{const.}$$

Vegyük szemügyre a

$$\mathbf{d} = \mathbf{pq} - \mathbf{qp}$$

mennyiséget.

A (11), (35) összefüggések alapján kapjuk:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{d}} &= \dot{\mathbf{p}}\mathbf{q} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}}\mathbf{p} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}} \\ &= \mathbf{q} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} \mathbf{q} + \mathbf{p} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{p}. \end{aligned}$$

A (22), (23) összefüggések alapján  $\dot{\mathbf{d}} = 0$  adódik s így  $\mathbf{d}$  átlós mátrix. A  $\mathbf{d}$  mátrix átlós komponenseit azonban éppen a (37) kvantumfeltétel rögzíti. Összefoglalásképpen, a (6) alatt definiált  $\mathbf{I}$  egységmátrix felhasználásával kapjuk a

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{I} \quad (38)$$

egyenletet, melyet „*élesített kvantumfeltétel*”-nek nevezünk és amelyen minden további következtetésünk alapszik.

Ezen egyenlet alakjából látható: Ha (38)-ból leszámaztatunk valamely ( $A$ ) egyenletet, úgy ( $A$ ) helyes marad, ha  $\mathbf{p}$ -t  $\mathbf{q}$ -val és egyidejűleg  $h$ -t  $-h$ -val helyettesítjük. Ezért pl. a

$$\mathbf{p}^n \mathbf{q} = \mathbf{q} \mathbf{p}^n + n \frac{h}{2\pi i} \mathbf{p}^{n-1}, \quad (39)$$

$$\mathbf{q}^n \mathbf{p} = \mathbf{p} \mathbf{q}^n - n \frac{h}{2\pi i} \mathbf{q}^{n-1} \quad (39')$$



egyenletek közül elég az egyiket (38)-ból kiindulva igazolni, ami indukció útján könnyen elvégezhető.

Az energia- és frekvenciatételt, amint azokat fent kimondottuk, először a

$$H = H_1(p) + H_2(q)$$

esetre kívánjuk igazolni.

Az 1. § fejtegetései értelmében itt  $H_1(p)$  és  $H_2(q)$  formálisan a

$$H_1 = \sum_s a_s p^s, \quad H_2 = \sum_s b_s q^s$$

hatványösszegekkel helyettesíthetők. Ekkor (39) és (39') segítségével belátható, hogy

$$\left. \begin{aligned} Hq - qH &= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial H}{\partial p}, \\ Hp - pH &= -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial H}{\partial q} \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

s az összehasonlítás a (35) mozgásegyenletekkel a

$$\left. \begin{aligned} \dot{q} &= \frac{2\pi i}{h} (Hq - qH), \\ \dot{p} &= \frac{2\pi i}{h} (Hp - pH) \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

összefüggéseket szolgáltatja.

Jelölje a  $Hg - gH$  mátrixot röviden  $\begin{vmatrix} H \\ g \end{vmatrix}$ ; ekkor fennáll

$$\begin{vmatrix} H \\ ab \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} H \\ a \end{vmatrix} b + a \begin{vmatrix} H \\ b \end{vmatrix}. \quad (42)$$

Innen pedig általánosságban következik  $g = g(pq)$ -ra:

$$\dot{g} = \frac{2\pi i}{h} \begin{vmatrix} H \\ g \end{vmatrix} = \frac{2\pi i}{h} (Hg - gH). \quad (43)$$

A bizonyításhoz csak azt kell tennünk, hogy  $\dot{g}$ -ot (11), (11') segítségével  $p, q$  és  $\dot{p}, \dot{q}$  függvényeként,  $\begin{vmatrix} H \\ g \end{vmatrix}$ -t pedig (42) segítségével  $p, g$  és  $\begin{vmatrix} H \\ p \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} H \\ q \end{vmatrix}$  függvényeként kifejezzük s ezután (41)-et alkalmazzuk. Ha speciálisan (43)-ba a  $g = H$  mátrixot helyettesítjük, a

$$\dot{H} = 0 \quad (44)$$

eredményt kapjuk.

Ezzel az energiatételt igazoltuk s tudjuk:  $H$  átlós mátrix. A (41) egyenletek ennek alapján a

$$h\nu(nm)q(nm) = (H(nn) - H(mm))q(nm),$$

$$h\nu(nm)p(nm) = (H(nn) - H(mm))p(nm)$$

alakba írhatók, ahonnan a frekvenciafeltétel következik.



Ha most figyelmünket általánosabb  $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^*(\mathbf{pq})$  Hamilton-függvényekre terjesztjük ki, úgy példákon — mondjuk a  $\mathbf{H}^* = \mathbf{p}^2 \mathbf{q}$  példán — könnyen felismerhetjük, hogy általában  $\dot{\mathbf{H}}^* = 0$  többé nem teljesül. Látjuk azonban, hogy a  $\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}^2 \mathbf{q} + \mathbf{qp}^2)$  Hamilton függvény ugyanazokat a mozgásegyenleteket szolgáltatja, mint  $\mathbf{H}^*$ , és  $\dot{\mathbf{H}}$  már zérussá válik. Az energia- és a frekvenciatételt eszerint a következő alakban mondjuk ki. Minden  $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^*(\mathbf{pq})$  függvényhez található olyan  $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{pq})$  függvény, hogy  $\mathbf{H}^*$  és  $\mathbf{H}$ , ha azokat Hamilton-függvényként fogjuk fel, ugyanazon mozgásegyenleteket szolgáltatják és hogy  $\mathbf{H}$  az ezen mozgásegyenletekhez tartozó, időben állandó  $s$  a frekvencia-feltételt teljesítő energia szerepét tölti be.

A fent elvégzett megfontolások után elég azt megmutatni, hogy a megszerkesztendő  $\mathbf{H}$  függvény

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \mathbf{H}^*}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}^*}{\partial \mathbf{q}} \quad (45)$$

mellett még a (40) egyenleteket is kielégíti. Az 1. §-ban mondottak szerint  $\mathbf{H}^*$  formálisan  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{q}$  hatványszorzatainak összege alakjában állítandó elő, és tekintettel arra, hogy a (40), (45) egyenletek lineárisak  $\mathbf{H}$ -ban és  $\mathbf{H}^*$ -ban, egyszerűen azt kell tennünk, hogy  $\mathbf{H}^*$  minden egyes összeadandójához megadjuk  $\mathbf{H}$  megfelelő összeadandóját. Csupán a

$$\mathbf{H}^* = \prod_{j=1}^k (\mathbf{p}^{s_j} \mathbf{q}^{r_j}) \quad (46)$$

setet kell tehát szemügyre vennünk. A 2. §-ban tett megjegyzések szerint a (45) egyenletek úgy elégíthetők ki, hogy  $\mathbf{H}$ -t  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{q}$  azon hatványszorzatainak lineáris alakjaként állítjuk elő, amelyek  $\mathbf{H}$ -ból a tényezők ciklikus felcseréléseivel nyerhetők; itt az együtthatók összegének 1-gyel kell egyenlőnek lennie. Kevésbé könnyű megválaszolni a kérdést: miképpen választandók ezek az együtthatók ahhoz, hogy a (40) egyenletek is teljesüljenek. Itt megelégszünk a  $k=1$ , vagyis a

$$\mathbf{H}^* = \mathbf{p}^s \mathbf{q}^r \quad (47)$$

eset elintézésével.

A (39) képlet általánosításaként adódik<sup>11</sup>:

$$\mathbf{p}^m \mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n \mathbf{p}^m = m \frac{h}{2\pi i} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{q}^{n-1-l} \mathbf{p}^{m-1} \mathbf{q}^l. \quad (48)$$

Az  $n=1$  esetben visszkapjuk (39)-et; általában (48) abból következik, hogy (39) folytán fennáll

$$\mathbf{p}^m \mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^{n+1} \mathbf{p}^m = (\mathbf{p}^m \mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n \mathbf{p}^m) \mathbf{q} + m \frac{h}{2\pi i} \mathbf{q}^n \mathbf{p}^{m-1}.$$

Itt  $\mathbf{p}$ -t és  $\mathbf{q}$ -t felcserélve és  $h$  előjelét ellentétesre változtatva új képletet nyerünk:

$$\mathbf{p}^m \mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n \mathbf{p}^m = n \frac{h}{2\pi i} \sum_{j=0}^{m-1} \mathbf{p}^{m-1-j} \mathbf{q}^{n-1} \mathbf{p}^j. \quad (48')$$



Ezt (48)-cal összehasonlítva kapjuk:

$$\frac{1}{s+1} \sum_{l=0}^s \mathbf{p}^{s-l} \mathbf{q}^r \mathbf{p}^l = \frac{1}{r+1} \sum_{j=0}^r \mathbf{q}^{r-j} \mathbf{p}^s \mathbf{q}^j. \quad (49)$$

Azt állítjuk, hogy a (47)-tal megadott  $\mathbf{H}^*$ -hoz

$$\mathbf{H} = \frac{1}{s+1} \sum_{l=0}^s \mathbf{p}^{s-l} \mathbf{q}^r \mathbf{p}^l \quad (50)$$

tartozik.

Igazolnunk csak (40)-et kell, s ehhez a 2. § (18') képletét kell emlékezetünkbe idéznünk.

Az (50) egyenletet felhasználva kapjuk:

$$\mathbf{H}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{H} = \frac{1}{s+1} (\mathbf{q}^r \mathbf{p}^{s+1} - \mathbf{p}^{s+1} \mathbf{q}^r),$$

s ez (48) szerint egyenértékű a (40) egyenletek közül a másodikkal.

Felhasználva (49)-et kapjuk továbbá:

$$\mathbf{H}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{H} = \frac{1}{r+1} (\mathbf{p}^s \mathbf{q}^{r+1} - \mathbf{q}^{r+1} \mathbf{p}^s),$$

ami (48') értelmében a (40) alatt elsőként felírt egyenlettel ekvivalens. Ezzel a kívánt bizonyítást hiánytalanul elvégeztük.

Míg a klasszikus mechanikában az energia állandóságát kifejező  $\dot{H}=0$  egyenlet közvetlenül leolvasható a kanonikus egyenletekből, a kvantummechanikában a  $\dot{H}=0$  energiatétel, mint látható, mélyebben fekszik.

Ha megkíséreljük  $\mathbf{H}$  állandóságát — szorosabban ragaszkodva a bizonyítás klasszikus gondolatmenetének mintájához — egyszerűen  $\mathbf{H}$  kiszámítása útján igazolni, nyomban felismerjük, mily távol áll a tétel igazolhatósága a tett feltevések alapján attól, hogy triviális legyen. Ebből a célból először (11), (11') segítségével

$\dot{H}$ -ot  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{q}$  és  $\dot{\mathbf{p}}$ ,  $\dot{\mathbf{q}}$  függvényeként kell előállítanunk, majd  $\dot{\mathbf{p}}$ ,  $\dot{\mathbf{q}}$  helyére a  $-\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}$ ,  $\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}$

értékeket kell behelyettesítenünk. Ez megadja  $\dot{H}$ -ot  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{q}$  függvényeként. A (38) egyenlet, ill. az abból lezármaztatott, a 11. lábjegyzetben közölt képletek lehetővé teszik, hogy ezt a függvényt  $\mathbf{a}\mathbf{p}^s\mathbf{q}^r$  alakú tagok összegévé alakítsuk át, és igazolnunk azt kell, hogy minden egyes ilyen tag  $\mathbf{a}$  együtthatója eltűnik. A számítás a legáltalánosabb, fent más módszerekkel elintézett esetben oly mértékben elbonyolódik,<sup>12</sup> hogy aligha látszik keresztülvihetőnek. Ha az energia- és a frekvenciatétel ennek ellenére ilyen általánosságban lehetett igazolni, ez — úgy látszik számunkra — erős támaszt nyújt a reményhez, hogy ez az elmélet valóban mély fizikai törvényeket ragad meg.

Végezetül hadd vázoljunk egy eredményt, mely ezen § képleteiből könnyen kiolvasható:  $\mathbf{A}$  (35), (37) egyenletek helyettesíthetők (38)-cal és (44)-gyel (ahol  $\mathbf{H}$  az energia); a frekvenciákat ekkor a frekvencia-feltételből kell meghatározni.

Az ezen tétel alapján tárgyalható fontos alkalmazásokkal e munka folytatásában foglalkozunk részletesen.

## 3. fejezet. Az anharmonikus oszcillátor vizsgálata

A

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{\omega_0^2}{2} q^2 + \frac{1}{3} \lambda q^3 \quad (51)$$

Hamilton-függvénnyel jellemzett anharmonikus oszcillátorral már *Heisenberg* behatóan foglalkozott. Ennek ellenére itt újra tanulmány tárgyává tesszük, mégpedig azzal a céllal, hogy meghatározzuk az alapegyenletek *legáltalánosabb* megoldását erre az esetre. Ha az elmélet alapegyenletei valóban teljesek és nem szorulnak további kiegészítésre, úgy azoknak *egyértelműen* meg kell határozniok  $q$  és  $p$  komponenseinek  $|q(nm)|$ ,  $|p(nm)|$  abszolútértékeit. Fontos, hogy ezt az (51) példán igazoljuk. Ezzel szemben várható, hogy a

$$q(nm) = |q(nm)| e^{i\varphi_{nm}},$$

$$p(nm) = |p(nm)| e^{i\psi_{nm}}$$

kifejezésekben szereplő  $\varphi_{nm}$ ,  $\psi_{nm}$  fázisokat illetően határozatlanság marad fenn. Pl. kvantumozott atomok és külső sugárzási terek kölcsönhatásának statisztikája szempontjából alapvető jelentőségű lesz, hogy e határozatlanság fokát pontosan meghatározzuk.

5. §. *A harmonikus oszcillátor.* Megfontolásaink kiindulópontja a harmonikus oszcillátor elmélete;  $\lambda$  kicsiny értékeire az (51) egyenlet szerint lefolyó mozgást úgy foghatjuk fel, hogy az a

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{\omega_0^2}{2} q^2 \quad (52)$$

energiához tartozó harmonikus rezgés megzavarásával állt elő.

Ezen egyszerű probléma esetében is szükséges, hogy *Heisenberg* megfontolásait kiegészítsük. *Heisenberg* korrespondencia-megfontolásból olvasott ki egy lényeges kijelentést a megoldás alakjára vonatkozóan; minthogy a klasszikus elméletben csak egy harmonikus komponens van jelen, a  $q$  mátrixot olyan alakban veszi fel, amely átmeneteket csak szomszédos szintek között enged meg:

$$q = \begin{pmatrix} 0 & q^{(01)} & 0 & 0 & 0 \dots \\ q^{(10)} & 0 & q^{(12)} & 0 & 0 \dots \\ 0 & q^{(21)} & 0 & q^{(23)} & 0 \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (53)$$

Mi arra törekszünk, hogy az egész elméletet önállóan építsük fel anélkül, hogy a klasszikus elmélet segítségéért folyamodnánk a korrespondencia-elv alapján. Ezért megvizsgáljuk, vajon a  $q$  mátrix (53) alakja levezethető-e magukból az alapegyenletekből, ill. ha ez nem lehetséges, milyen további követelményeket kell támasztanunk.

Abból, amit a 3. §-ban a sorok és oszlopok permutációival szemben mutatott invarianciáról mondtunk, minden további nélkül látható, hogy az (53) mátrix pontos alakja sohasem határozható meg az alapegyenletekből; ha ugyanis a sorokat



és az oszlopokat ugyanazon permutációnak vetjük alá, úgy a kanonikus egyenletek és a kvantumfeltétel invariánsak maradnak, így tehát új, az előbbtől látszólag különböző megoldást nyerünk. Mindezek a megoldások azonban természetesen csak az írásmódban, vagyis az elemek számozásában különböznek. Be fogjuk bizonyítani, hogy a megoldás az elemek puszta átszámozásával mindenkor az (53) alakra hozható. A

$$\ddot{\mathbf{q}} + \omega_0^2 \mathbf{q} = 0 \quad (54)$$

mozgásegyenlet az elemekre vonatkozóan így hangzik:

$$(v^2(nm) - v_0^2)q(nm) = 0, \quad (55)$$

ahol

$$\omega^0 = 2\pi\nu_0, \quad h\nu(nm) = W_n - W_m.$$

A

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1} \quad (56)$$

élesített kvantumfeltételből következik, hogy minden  $n$ -hez léteznie kell egy  $n'$ -nek, úgyhogy  $q(nn') \neq 0$ ; ha ugyanis léteznék olyan  $n$ , amely mellett minden  $n'$ -re  $q(nn') = 0$  volna, úgy  $\mathbf{pq} - \mathbf{qp}$  mátrix  $n$ -edik átlós eleme zérus lenne, ami ellentmond a kvantumfeltételnek. Eszerint (55)-ből az adódik, hogy mindenkor létezik egy  $n'$ , melyre

$$|W_n - W_{n'}| = h\nu_0.$$

Minthogy azonban alapelveink között szerepel a feltevés, mely szerint  $n \neq m$  esetén  $W_n \neq W_m$ , legfeljebb két ilyen  $n', n''$  index létezhet; a megfelelő  $W_{n'}, W_{n''}$  átlós elemek ugyanis a

$$(W_n - x)^2 = h^2\nu_0^2$$

másodfokú egyenlet megoldásai. Ha valóban két ilyen  $n', n''$  index létezik, úgy a megfelelő rezgésszámokra következik:

$$\nu(nn') = -\nu(nn''). \quad (57)$$

Ennek alapján (56)-ból kapjuk:

$$\sum_k \nu(kn) |q(nk)|^2 = \nu(n'n) \{ |q(nn')|^2 - |q(nn'')|^2 \} = \frac{h}{8\pi^2}, \quad (58)$$

az (52) energia  $nm$  elemére pedig

$$\begin{aligned} H(nm) &= \frac{1}{2} 4\pi^2 \sum_k \{ -\nu(nk)\nu(km)q(nk)q(km) + \nu_0^2 q(nk)q(km) \} \\ &= 2\pi^2 \sum_k q(nk)q(km) \{ \nu_0^2 - \nu(nk)\nu(km) \} \end{aligned}$$

adódik. Speciálisan az  $m=n$  esetben:

$$H(nn) = W_n = 4\pi^2\nu_0^2(|q(nn')|^2 + |q(nn'')|^2). \quad (59)$$

A továbbiakban három eset lehetséges:

- a)  $n''$  nem létezik és  $W_{n'} > W_n$ ;
- b)  $n''$  nem létezik és  $W_{n'} < W_n$ ;
- c)  $n''$  létezik.

A b) esetben  $n$  helyett vegyük szemügyre  $n'$ -t; ehhez legfeljebb két  $(n)'$ ,  $(n)''$  index tartozik s ezek közül az egyiknek  $n$ -nel kell egyenlőnek lennie. Ily módon az a) vagy a c) esetet kapjuk vissza s így a b) eset elhagyható. Az a) esetben  $v(n'n) = +v_0$  és (58-ból)

$$v_0 \cdot |q(nn')|^2 = \frac{h}{8\pi^2} \quad (60)$$

következik; (59) alapján kapjuk tehát:

$$W_n = H(nn) = 4\pi^2 v_0^2 |q(nn')|^2 = \frac{1}{2} v_0 h.$$

A feltevés folytán, mely szerint  $n \neq m$  esetén  $W_n \neq W_m$ , legfeljebb egy olyan  $n = n_0$  index létezik, melyre az a) eset áll fenn.

Ha létezik egy ilyen  $n_0$ , megadható az

$$n_0 n_1 n_2 n_3 \dots$$

számsorozat oly módon, hogy

$$(n_k)' = n_{k+1} \quad \text{és} \quad W_{k+1} > W_k.$$

Ekkor minden esetben

$$(n_{k+1})'' = n_k.$$

Így tehát  $k > 0$  esetén (58)-ból és (59)-ből kapjuk:

$$H(n_k n_k) = 4\pi^2 v_0^2 \{ |q(n_k, n_{k+1})|^2 + |q(n_k, n_{k-1})|^2 \}, \quad (61)$$

$$\frac{1}{2} h = 4\pi^2 v_0 \{ |q(n_k, n_{k+1})|^2 - |q(n_k, n_{k-1})|^2 \}. \quad (62)$$

A (60) és (62) képletekből

$$|q(n_k, n_{k+1})|^2 = \frac{h}{8\pi^2 v_0} (k+1) \quad (63)$$

következik, majd ezt figyelembe véve (61)-ből

$$W_{n_k} = H(n_k, n_k) = v_0 h \left( k + \frac{1}{2} \right) \quad (64)$$

eredményt kapjuk.

Meg akarjuk még vizsgálni, lehetséges-e, hogy ne létezzék olyan  $n$ , amelyre az a) eset teljesül. Ebben az esetben tetszőleges  $n_0$ -al kezdve képezhetnénk  $n'_0 = n_1$ -et és  $n''_0 = n_{-1}$ -et, majd ezek mindegyikéhez  $n'_1 = n_2$ -t és  $n''_1 = n_0$ -at, ill.  $n''_{-1} = n_0$ -at és  $n''_{-2} = n_{-1}$ -t. Ily módon az

$$\dots n_{-2} n_{-1} n_0 n_1 n_2 \dots \quad (65)$$

számsorozatot nyerjük és a (61), (62) egyenletek  $-\infty$  és  $+\infty$  között minden  $k$ -ra teljesülnek. Ez azonban lehetetlen; (62) szerint ugyanis az  $x_k = |q(n_{k+1}, n_k)|^2$  mennyiségek ekvidisztans számsorozatot alkotnak, és minthogy pozitívak, kell közöttük



legkisebbnek lennie. A megfelelő indexet ismét jelölhetjük  $n_0$ -lal s így visszkapjuk az előbbi esetet; most is érvényesek tehát a (63), (64) képletek.

Látható továbbá: az  $n_k$  számok között minden  $n$  számnak fel kell lépnie; ha nem így volna,  $n$ -ből kiindulva képezhetnénk egy új (65) sorozatot és ismét teljesülne a (60) formula. Mindkét sorozat kezdő tagjához ugyanaz a  $W_n = H(nn)$  érték tartoznék tehát, ami lehetetlen.

Ezzel igazoltuk, hogy a  $0, 1, 2, 3, \dots$  indexek új  $n_0, n_1, n_2, n_3, \dots$  sorrendbe rendezhetők át oly módon, hogy fennálljanak a (63) (64) képletek; ezen új indexek mellett azután a megoldás az (53) Heisenberg-féle alakot ölti. Ez tehát láthatóan az általános megoldás „normálalakja”. Mint (64) mutatja, ez a

$$W_{n_k+1} > W_{n_k}$$

tulajdonsággal rendelkezik. Ha — megfordítva — azt a követelményt támasztjuk, hogy  $W_n = H(nn)$  az  $n$ -nel monoton növekedjék, úgy szükségszerűen  $n_k = k$  adódik. Ez az elv tehát egyértelműen meghatározza a normálalakot. Itt azonban csak arról van szó, hogy az írásmódot rögzítjük és a számításoknak áttekinthetőbb alakot adunk; *fizikailag* semmi új nem adódik.

Ebben mély különbség rejlik a stacionárius állapotok eddig használatos félklasszikus meghatározásával szemben. A klasszikusan számított pályák folytonos sereget alkotnak, minek folytán az utólag kiválasztott kvantumpályák kezdettől fogva meghatározott sorrendben következnek egymás után. Az új mechanika igazi diszkontinuum-elmélet, amennyiben itt nincs szó a kvantumállapotok ilyen, a fizikai folyamat által definiált sorrendjéről; a kvantumszámok itt valóban csak az állapotok megkülönböztetésére használt indexek, melyeket valamilyen gyakorlati szempont szerint (pl. a  $W_n$  energia növekedésének megfelelően) rendezhetünk el sorba és normálhatunk.

#### 6. §. Az anharmonikus oszcillátor. A

$$\ddot{\mathbf{q}} + \omega_0^2 \mathbf{q} + \lambda \mathbf{q}^2 = 0 \quad (66)$$

mozgásegyenletek a kvantumfeltétellel együtt a következő egyenletrendszert szolgáltatják  $\mathbf{q}$  elemeire:

$$\left. \begin{aligned} (\omega_0^2 - \omega^2(nm))q(nm) + \lambda \sum_k q(nk)q(km) &= 0, \\ \sum_k \omega(nk)q(nk)q(kn) &= -\frac{h}{4\pi}. \end{aligned} \right\} \quad (67)$$

Ezt az

$$\left. \begin{aligned} \omega(nm) &= \omega^0(nm) + \lambda \omega^{(1)}(nm) + \lambda^2 \omega^{(2)}(nm) + \dots \\ q(nm) &= q^0(nm) + \lambda q^{(1)}(nm) + \lambda^2 q^{(2)}(nm) + \dots \end{aligned} \right\} \quad (68)$$

sorok segítségével kíséreljük meg kielégíteni.

Ha  $\lambda=0$ , a harmonikus oszcillátornak az előző §-ban tárgyalt esetét kapjuk; az (53) megoldást a

$$q^0(nm) = a_n \delta_{n,m-1} + \bar{a}_m \delta_{n-1,m} \quad (69)$$

alakban írjuk, ahol a felülvonás a komplex-konjugálást jelenti. A  $\mathbf{q}^0 = (q^0(nm))$  mátrix négyzetét és magasabb hatványait képezve hasonló mátrixok adódnak,

nevezetesen

$$(\xi)_{nm}^{(p)} = \xi_n \delta_{n,m-p} + \bar{\xi}_m \delta_{n-p,m} \quad (70)$$

alakú tagokból álló összegek. Kézenfekvő tehát feltenni, hogy a megoldás a

$$\left. \begin{aligned} q^0(nm) &= (a)_{nm}^{(1)}, \\ q^{(1)}(nm) &= (x)_{nm}^0 + (x')_{nm}^{(2)}, \\ q^{(2)}(nm) &= (y)_{nm}^{(1)} + (y')_{nm}^{(3)}, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \right\} \quad (71)$$

alakú, ahol a  $p$  index páratlan és páratlan értékei rendre váltakoznak.

Valóban, ha ezeket behelyettesítjük az

$$\lambda: \left\{ \begin{aligned} &(\omega_0^2 - \omega^0(nm)^2)q^{(1)}(nm) - 2\omega^0(nm)\omega^{(1)}(nm)q^0(nm) + \\ &\quad + \sum_k q^0(nk)q^0(km) = 0, \\ &\sum_k \{ \omega^0(nk)(q^0(nk)q^{(1)}(kn) + q^{(1)}(nk)q^0(kn)) + \\ &\quad + \omega^{(1)}(nk)q^0(nk)q^0(kn) \} = 0, \end{aligned} \right\} \quad (72)$$

$$\lambda^2: \left\{ \begin{aligned} &(\omega_0^2 - \omega^0(nm)^2)q^{(2)}(nm) - 2\omega^0(nm)\omega^{(1)}(nm)q^{(1)}(nm) - \\ &\quad - (\omega^{(1)}(nm)^2 + 2\omega^0(nm)\omega^{(2)}(nm))q^0(nm) + \\ &\quad + \sum_k (q^0(nk)q^{(1)}(km) + q^{(1)}(nk)q^0(km)) = 0, \\ &\sum_k \{ \omega^0(nk)(q^0(nk)q^{(2)}(km) + q^{(1)}(nk)q^{(1)}(km) + \\ &\quad + q^{(2)}(nk)q^0(km)) + \omega^{(1)}(nk)(q^0(nk)q^{(1)}(km) + \\ &\quad + q^{(1)}(nk)q^0(km)) + \omega^{(2)}(nk)q^0(nk)q^0(km) \} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (73)$$

közeítő egyenletekbe és tekintetbe vesszük a

$$\begin{aligned} \sum_k \Omega_{nkm}(\xi)_{nk}^{(p)}(\eta)_{km}^{(q)} &= \Omega_{n,n+p,n+p+q} \xi_n \eta_{m+p} \delta_{n,m-p-q} \\ &\quad + \Omega_{n,n+p,n+p-q} \xi_n \bar{\eta}_{n+p-q} \delta_{n,m-p+q} \\ &\quad + \Omega_{n,n-p,n-p+q} \bar{\xi}_{n-p} \eta_{n-p} \delta_{n,m+p-q} \\ &\quad + \Omega_{n,n-p,n-p-q} \bar{\xi}_{n-p} \eta_{n-p-q} \delta_{n,m+p+q} \end{aligned} \quad (74)$$

szorzási szabályt, az egyes  $\delta_{n,m-s}$ -ek mellett álló faktorokat egyenként zérussal egyenlővé téve láthatjuk, hogy a (71) próbakifejezéssel valamennyi feltétel éppen teljesíthető és hogy a (71)-hez járuló magasabbrendű tagok azonosan zérusnak adódnának.

Ami a részleteket illeti, a számítás a következőket adja:

A (72) egyenletek közül az első, ha abba behelyettesítjük a (71) kifejezéseket, a

$$\left\{ \begin{aligned} 2\omega_0^2 x_n + |a_n|^2 + |a_{n-1}|^2 &= 0, \\ -3\omega_0^2 x_{n'} + a_n a_{n+1} &= 0, \\ \omega_{n,n-1}^{(1)} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (75)$$



összefüggéseket adja; a második azonosan teljesül. Kapjuk tehát:

$$\left. \begin{aligned} x_n &= -\frac{|a_n|^2 + |a_{n-1}|^2}{2\omega_0^2}, \\ x'_n &= \frac{a_n a_{n+1}}{3\omega_0^2}. \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

A (73) egyenletek közül az elsőből kapjuk:

$$\begin{aligned} 2\omega_0 a_n \omega_{n,n+1}^{(2)} + 2a_n x_{n+1} + 2a_n x_n + \bar{a}_{n-1} x'_{n-1} + \bar{a}_{n+1} x'_n &= 0, \\ -8\omega_0^2 y'_n + a_n x'_{n+1} + a_{n+2} x'_n &= 0, \\ \omega_{n,n-2}^{(1)} &= 0; \end{aligned} \quad (77)$$

a második egyenlet nem teljesül azonosan, hanem  $y_n$  meghatározására szolgáltat összefüggést:

$$\left. \begin{aligned} a_n \bar{y}_n + \bar{a}_n y_n - a_{n-1} \bar{y}_{n-1} - \bar{a}_{n-1} y_{n-1} + 2|x'_n|^2 - 2|x'_{n-2}|^2 \\ - \frac{\omega_{n,n+1}^{(2)}}{\omega_0} |a_n|^2 - \frac{\omega_{n,n-1}^{(2)}}{\omega_0} |a_{n-1}|^2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (78)$$

A megoldás így hangzik:

$$\begin{aligned} \omega_{n,n+1}^{(2)} &= \frac{1}{3\omega_0^3} (|a_{n+1}|^2 + |a_{n-1}|^2 + 3|a_n|^2), \\ y'_n &= \frac{1}{12\omega_0^4} a_n a_{n+1} a_{n+2}. \end{aligned} \quad (79)$$

Vezessük be az

$$\eta_n = a_n \bar{y}_n + \bar{a}_n y_n \quad (80)$$

rövid jelölést;  $\eta$  az

$$\eta_n - \eta_{n-1} = \frac{1}{\omega_0^4} \left( |a_n|^4 - |a_{n-1}|^4 + \frac{1}{9} |a_n|^2 |a_{n+1}|^2 - \frac{1}{9} |a_{n-1}|^2 |a_{n-2}|^2 \right) \quad (81)$$

egyenletből határozható meg. A (76) és (79) kifejezések azt mutatják, hogy az  $x_n$ ,  $x'_n$ ,  $y'_n$  mennyiségek kifejezhetők a nulladik közelítésben nyert  $a_n$  megoldással. Fázisaikat tehát a harmonikus oszcillátor fázisai meghatározzák. Úgy látszik, más a helyzet az  $y_n$  mennyiség esetében; bár  $\eta_n$  egyértelműen meghatározható (81)-ből, de  $y_n$ -et (80) nem határozza meg egyértelműen. Valószínű, hogy a következő közelítésben kiegészítő egyenlet adódik  $y_n$  meghatározására: itt nyitva kell hagynunk a kérdést, rá kell azonban mutatnunk annak elvi fontosságára az egész elmélet zártága szempontjából. Minden statisztikus kérdés számára igen lényeges, helyes-e sejtésünk, mely szerint a  $q(nm)$ -ek fázisai közül a mátrix minden sorában (vagy minden oszlopában) egy határozatlan marad.

Befejezésül megadjuk az explicit képleteket, melyeket akkor kapunk, ha a harmonikus oszcillátorra korábban (5. §) talált megoldást behelyettesítjük. Ez a normálalakban (63) szerint így hangzik:

$$a_n = \sqrt{C(n+1)} e^{i\varphi_n}, \quad C = \frac{h}{4\pi\omega_0} = \frac{h}{8\pi^2 v_0}. \quad (82)$$

Ezt felhasználva (76), (79), (81) alapján kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} x_n &= -\frac{C}{2\omega_0^2} (2n+1), \\ x'_n &= \frac{C}{3\omega_0^2} \sqrt{(n+1)(n+2)} e^{i(\varphi_n + \varphi_{n+1})}, \\ y'_n &= \frac{\sqrt{C^3}}{12\omega_0^4} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} e^{i(\varphi_n + \varphi_{n+1} + \varphi_{n+2})}; \end{aligned} \right\} \quad (83)$$

$$\left. \begin{aligned} \omega_{n,n-1}^{(1)} &= 0, & \omega_{n,n-2}^{(1)} &= 0, \\ \omega_{n,n-1}^{(2)} &= -\frac{5}{3} \frac{C}{\omega_0^3} n; \end{aligned} \right\} \quad (84)$$

eszerint

$$\eta_n - \eta_{n-1} = \frac{11}{9} \frac{C^2}{\omega_0^4} (2n+1),$$

$$\eta_n = a_n \bar{y}_n + \bar{a}_n y_n = \frac{11}{9} \frac{C^2}{\omega_0^4} (n+1)^2.$$

Legyen  $y_n = |y_n| e^{i\psi_n}$ ; ekkor

$$|y_n| \cos(\varphi_n - \psi_n) = \frac{\eta_n}{2|a_n|} = \frac{11}{18} \frac{\sqrt{C^3}}{\omega_0^4} \sqrt{n+1}^3. \quad (85)$$

Ebben a közelítésben többet  $y_n$ -ről nem mondhatunk.

Még felírjuk a végképleteket a  $\psi_n = \varphi_n$  feltevés mellett. Kapjuk (a  $\lambda$ -ban másodrendű tagokig bezárólag):

$$\left. \begin{aligned} \omega(n, n-1) &= \omega_0 - \lambda^2 \frac{5}{3} \frac{C}{\omega_0^2} n + \dots, \\ \omega(n, n-2) &= 2\omega_0 + \dots; \end{aligned} \right\} \quad (86)$$

$$\left. \begin{aligned} q(n, n) &= -\lambda \frac{C}{\omega_0^2} (2n+1) + \dots, \\ q(n, n-1) &= \sqrt{C} n e^{i\varphi_{n-1}} \left( 1 + \lambda^2 \frac{11}{18} \frac{Cn}{\omega_0^4} + \dots \right), \\ q(n, n-2) &= \lambda \frac{C}{3\omega_0^2} \sqrt{n(n-1)} e^{i(\varphi_{n-1} + \varphi_{n-2})} + \dots, \\ q(n, n-3) &= \lambda^2 \frac{\sqrt{C^3}}{12\omega_0^4} \sqrt{n(n-1)(n-2)} e^{i(\varphi_{n-1} + \varphi_{n-2} + \varphi_{n-3})} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (87)$$



Az energiát ugyancsak kiszámítottuk közvetlenül; a kapott eredmény:

$$W_n = h\nu_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) - \lambda^2 \frac{5}{3} \frac{C^2}{\omega_0^2} \left( n(n+1) + \frac{17}{30} \right) + \dots \quad (88)$$

A frekvenciafeltétel tényleg teljesül: (82)-t tekintetbe véve ugyanis kapjuk:

$$W_n - W_{n-1} = h\nu_0 - \lambda^2 \frac{2C^2}{\omega_0^2} n + \dots = \frac{h}{2\pi} \omega(n, n-1),$$

$$W_n - W_{n-2} = 2h\nu_0 + \dots = \frac{h}{2\pi} \omega(n, n-2).$$

A (88) képlethez *Heisenberg*gel azt a megjegyzést fűzhetjük, hogy már a legalacsonyabb rendű tagban eltérés jelentkezik a klasszikus elmélettől, mely formálisan az  $n' = n + \frac{1}{2}$  „feles” kvantumszám bevezetésével megszüntethető. Egyébként  $\omega(n, n-1)$  (86)-ból adódó kifejezései és a klasszikus frekvenciák *pontosan* megegyeznek. A klasszikus energia ugyanis<sup>13</sup>

$$W_n^{(kl)} = h\nu_0 n - \lambda^2 \cdot \frac{5}{3} \frac{C^2}{\omega_0^2} n^2 + \dots,$$

a klasszikus frekvencia tehát

$$\omega_{kl} = \frac{1}{h} \frac{\partial W_n^{(kl)}}{\partial n} = h\nu_0 - \lambda^2 \frac{5}{3} \frac{C^2}{\omega_0^2} n + \dots$$

$$= \omega_{kv}(n, n-1) = \frac{1}{h} (W_n^{(kv)} - W_{n-1}^{(kv)}).$$

Végül ellenőriztük: a (88) kifejezés megkapható a *Kramers–Born-féle* perturbációs képletből is (az additív állandótól eltekintve).

#### 4. fejezet. Megjegyzések az elektrodinamikáról

*Heisenberg* felteszi, hogy  $\mathbf{q}$  elemeinek  $|q(nm)|^2$  abszolútérték-négyzete abban az esetben, ha  $\mathbf{q}$  Descartes-koordináta, a kvantumugrások valószínűségének mértékéül szolgál. Végezetül itt szeretnénk kifejteni, hogy ez a feltevés miképpen alapozható meg általánosabb megfontolásokból kiindulva. Ehhez foglalkoznunk kell a kérdéssel, hogy az elektrodinamika alapegyenleteinek miképpen adható az új elmélet szellemében új értelmezés. Hangsúlyozni kívánjuk, hogy az itt közölt megfontolások csupán előzetes jellegűek; rajtuk keresztül a feladatot illető elvi állásfoglalásunkat szeretnénk kifejezésre juttatni. Az itt felmerülő kérdések részletes tárgyalását később adjuk meg, taglalva mindenek előtt az itt kifejtett elmélet viszonyát a fénykvantumok elméletéhez.

Itt csak olyan megállapításokról ejtünk szót, amelyekhez nem kell a kvantumfeltétel több szabadsági fokú rendszerekre érvényes egzakt alakjával foglalkoznunk. Azt, hogy ebben a tekintetben az elektrodinamika éppen eléggé messzire vezet, a következő megfontolással lehet belátni. Valamely *üreg*, melyben elektromágneses

rezgések lehetségesek, egy *végtelen sok szabadsági fokú* rendszer. Ennek ellenére tárgyalásához elégségesek az előző fejezetekben kifejtett alapelvek, melyek tudva-levően *egy szabadsági fokkal* rendelkező rendszerekre vonatkoznak. Ha ugyanis elvégezzük a felbontást sajátrezgésekre, *kölcsönhatásmentes* oszcillátorok rendszerét nyerjük. Aligha lehet kétségünk afelől, miként tárgyalandó ez a rendszer. Itt különösen jelentősnek bizonyul az a körülmény, hogy az elektromágneses alapegyenletek lineárisak (szuperpozíció-elv); ebből következik, hogy a felbontással nyert oszcillátorok *harmonikusak*, és éppen a harmonikus oszcillátor esetében áll fenn — ellentétben más rendszerek viselkedésével — az energiatétel érvényessége a kvantumfeltételtől függetlenül. Kiindulva ui. a

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega_0^2 q^2)$$

Hamilton-függvényből, nyerjük:

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \frac{1}{2} (\dot{p}p + p\dot{p} + \omega_0^2 \dot{q}q + \omega_0^2 q\dot{q}) \\ &= \frac{1}{2} \omega_0^2 (-qp - pq + pq + qp) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Várható tehát, hogy ennek megfelelően az üres tér elektrodinamikájának integráltételei (energia- és impulzustétel) egészen általánosan megkaphatók egyedül az új mátrixelméleti értelmezést nyert Maxwell-egyenletekből, anélkül, hogy a kvantumfeltételhez kellene folyamodnunk. Miközben ezt megmutatjuk, egyszersem megtaláljuk a módját, hogy *Heisenberg* állítását  $|q(nm)|^2$  jelentéséről megalapozzuk.

7. §. *Maxwell-egyenletek, energia- és impulzustétel.* Megállapodunk abban, hogy a *vektorokat* szokás szerint mindenütt gót betűkkel jelöljük, a számok és a mátrixok megkülönböztetésére pedig megtartjuk a vékony, ill. a vastag szedést. A mértékegységek tekintetében az *Abraham* tankönyvében<sup>14</sup> alapul vett választást követjük.

Az elektromágneses folyamatok üres térben síkhullámok szuperpozíciójaként írhatók le. Egy-egy ilyen síkhullámban az  $\mathfrak{E}$  és  $\mathfrak{H}$  elektromos, ill. mágneses térerőségeket *mátrixoknak* tekintjük, melyeknek elemei harmonikus rezgést végző síkhullámok; alkalmasan választott koordináta-rendszerben pl.

$$\mathfrak{E} = \left( \mathfrak{E}(nm) e^{2\pi i \mathbf{v}(nm) \left( t - \frac{x}{c} \right)} \right). \quad (89)$$

Természetesen számolnunk kell azzal, hogy  $n, m$  változása általában nem korlátozódik diszkrét értékek halmazára, és hogy nem egyes számokat, hanem számrendszereket (vektorokat) jelentenek.

A Maxwell-egyenleteket megtartjuk mint mátrixegyenleteket:

$$\text{rot } \mathfrak{H} - \frac{1}{c} \dot{\mathfrak{E}} = 0, \quad \text{rot } \mathfrak{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathfrak{H}} = 0. \quad (90)$$



Ezeket úgy kell elgondolnunk, hogy a differenciálisokat  $x, y, z, t$ , szerint minden egyes elemen külön-külön elvégeztük.<sup>15</sup>

Vezessük le most az energia-impulzus-tételt. Ehhez előre kell bocsátanunk néhány megjegyzést a mátrixvektorok szorzásáról.

A skalárszorzatot az

$$(\mathfrak{A}, \mathfrak{B}) = \mathfrak{A}\mathfrak{B} = \mathfrak{A}_x\mathfrak{B}_x + \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_y + \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_z, \quad (91)$$

a vektorszorzatot az

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{B}]_x = \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_z - \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_y \quad (92)$$

képlettel definiáljuk. Minthogy a mátrixszorzás nem kommutatív, az

$$\mathfrak{A}\mathfrak{B} = \mathfrak{B}\mathfrak{A}, \quad [\mathfrak{A}\mathfrak{B}] = -[\mathfrak{B}\mathfrak{A}]$$

relációk általában *nem* teljesülnek.

Azt állítjuk azonban, hogy fennáll

$$\text{div} [\mathfrak{A}\mathfrak{B}] = (\text{rot } \mathfrak{A}, \mathfrak{B}) - (\mathfrak{A}, \text{rot } \mathfrak{B}). \quad (93)$$

Definiálja a  $\mathbf{W}$  *energiasűrűséget* (mely skaláris mátrix) a

$$\mathbf{W} = \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{H}^2) \quad (94)$$

képlet. Ekkor (11) értelmében írható:

$$8\pi \dot{\mathbf{W}} = \mathfrak{E}\dot{\mathfrak{E}} + \dot{\mathfrak{E}}\mathfrak{E} + \mathfrak{H}\dot{\mathfrak{H}} + \dot{\mathfrak{H}}\mathfrak{H}.$$

Felhasználva (90)-et, kapjuk:

$$\frac{8\pi}{c} \dot{\mathbf{W}} = (\mathfrak{E}, \text{rot } \mathfrak{H}) + (\text{rot } \mathfrak{H}, \mathfrak{E}) - (\mathfrak{H}, \text{rot } \mathfrak{E}) - (\text{rot } \mathfrak{E}, \mathfrak{H}),$$

(93) alapján írható tehát:

$$\dot{\mathbf{W}} + \text{div } \mathfrak{S} = 0, \quad (95)$$

ahol

$$\mathfrak{S} = \frac{c}{8\pi} ([\mathfrak{E}\mathfrak{H}] - [\mathfrak{H}\mathfrak{E}]). \quad (96)$$

Ez *Poynting tétele* a mátrixelektrodinamikában;  $\mathfrak{S}$  az *energiaáramsűrűség* vektora.

Hasonló módon vezethető le az impulzustétel. A *Maxwell-féle feszültségeket* a

$$\left. \begin{aligned} T_{xx} &= \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{E}_x^2 - \mathfrak{E}_y^2 - \mathfrak{E}_z^2) + (\mathfrak{H}_x^2 - \mathfrak{H}_y^2 - \mathfrak{H}_z^2), \\ T_{yz} &= \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{E}_y\mathfrak{E}_z + \mathfrak{E}_z\mathfrak{E}_y + \mathfrak{H}_y\mathfrak{H}_z + \mathfrak{H}_z\mathfrak{H}_y) \end{aligned} \right\} \quad (97)$$

képletekkel, a sugárzás *impulzussűrűségét* a

$$\mathfrak{g} = \frac{1}{c^2} \mathfrak{S} = \frac{1}{8\pi c} ([\mathfrak{E}\mathfrak{H}] - [\mathfrak{H}\mathfrak{E}]) \quad (98)$$

képlettel definiáljuk. Ezek után hasonló számítással kapjuk:

$$\dot{\mathbf{g}}_x = \frac{\partial \mathbf{T}_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{T}_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{T}_{xz}}{\partial z}. \quad (99)$$

Ezen összefüggések természetesen áttekinthetőbb alakot nyernek, ha a relativitás-elmélet négydimenziós írásmódját alkalmazzuk. A négydimenziós vektoranalízis és a relativitáselmélet rendszeres tárgyalását a nem-kommutatív szorzással dolgozó mátrixelmélet alapján másutt fogjuk megadni.

8. §. *Gömbhullámok. Dipólus sugárzása.* Célunk, az oszcillátor sugárzásának kiszámítása felé haladva most a *gömbhullámokat* kell szemügyre vennünk.

Ehhez bevezetjük a  $\mathfrak{J}$  Hertz-vektort mint mátrixvektort;  $\mathfrak{J}$ -ből  $\mathfrak{E}$  és  $\mathfrak{H}$  az

$$\mathfrak{E} = \text{grad div } \mathfrak{J} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathfrak{J}}, \quad \mathfrak{H} = \frac{1}{c} \text{rot } \dot{\mathfrak{J}} \quad (100)$$

egyenletek segítségével nyerhető. A klasszikus elméletben  $\mathfrak{J}$  gömbhullám esetében az

$$\frac{1}{r} e^{2\pi i v \left(t - \frac{r}{c}\right)}$$

kifejezéssel arányos.

Ismeretes, hogy ez a kifejezés az

$$\frac{e^{i\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\kappa}}}{r} = \frac{i\boldsymbol{\kappa}}{2\pi} \int e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\delta})} d\omega \quad (101)$$

azonosság felhasználásával felírható mint síkhullámok szuperpozíciója;<sup>16</sup> itt  $\mathbf{r}$  a gömbhullám centrumát azon ponttal összekötő numerikus vektor, amelyben a térmennyiségeket ismerni akarjuk,  $\boldsymbol{\delta}$  egységvektort jelöl, végül  $d\omega = d\delta_x d\delta_y d\delta_z$ . Ugyanígy a mi elméletünkben is a (89) alakban mátrixok segítségével előállított síkhullámokból a hullámnormális irányra integrálva gömbhullám előállítását nyerjük:

$$\mathfrak{J} = \left( e\mathbf{q}(nm) \frac{e^{2\pi i v(nm) \left(t - \frac{r}{c}\right)}}{r} \right); \quad (102)$$

itt az  $e\mathbf{q} = (e\mathbf{q}(nm))$  mátrix a hullámot gerjesztő elektromos momentumot reprezentálja.

A számítások, melyek innen az elektromágneses tér és az egységnyi idő alatt kisugárzott energia meghatározásához elvezetnek, megegyeznek a klasszikus elméletben végzett számításokkal, minthogy az  $\mathbf{r}$  numerikus vektor minden mátrixszal felcserélhető. Kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} \mathfrak{H} &= -\frac{e}{c^2} \frac{1}{r^2} [\mathbf{r} \dot{\mathbf{q}}], \\ \mathfrak{E} &= \frac{e}{c^2} \frac{1}{r^3} [\mathbf{r} [\mathbf{r} \ddot{\mathbf{q}}]], \end{aligned} \right\} \quad (103)$$



ahonnan az

$$\mathfrak{E} = \frac{e}{4\pi c^3} \frac{v}{r} [\ddot{\mathbf{q}}]^2 \quad (104)$$

eredmény adódik.

Az integráció az összes térirányra ugyanúgy végezhető el, mint a klasszikus elméletben. Az egységnyi idő alatt kisugárzott energia kifejezésére kapjuk:

$$\int \mathfrak{E} d\tau = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{\mathbf{q}}^2. \quad (105)$$

Az egységnyi idő alatt kisugárzott energia átlagát megkapjuk, ha ezt a kifejezést átlagoljuk az időre; így adódik a

$$\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \overline{\ddot{\mathbf{q}}^2} \quad (106)$$

átlós mátrix.

Ha az oszcillátor rezgéseit rögzített irány mentén végzi, úgy a  $\mathbf{q}$  mátrixvektor a  $\mathbf{q} = (q(nm))$  skaláris mátrixszal helyettesíthető; ekkor az egységnyi idő alatt kisugárzott energia átlaga (az ún. kisugárzás).

$$\frac{2e^2}{3c^3} \overline{\ddot{\mathbf{q}}^2} = \frac{32\pi^4 e^2}{3c^2} \left( \sum_k v(nk)^4 |q(nk)|^2 \right). \quad (107)$$

Itt még nem tudjuk megadni a sugárzás folyamatának teljes elméletét, melyből szükségszerűen következnek, miként kell e sor egyes tagjait a stacionárius állapotokhoz hozzárendelni; ehhez pontosan meg kellene vizsgálni a sugárzás visszahatását az oszcillátorra, vagyis ki kellene dolgoznunk a sugárzási csillapítás elméletét. Erre később fogunk visszatérni. Itt csak azt kívánjuk megvizsgálni, vajon a kisugárzást valóban a  $|q(nk)|^2$  mennyiségek határozzák-e meg; a (107) kifejezés mutatja, hogy ez valóban így van, ugyanakkor azonban látjuk, hogy a felírt mennyiség nem az egyes stacionárius állapotokból kiinduló spontán sugárzások összegének felel meg. A spontán átmenetek ugyanis mindig csak a kisebb energiájú vagy alkalmas számozás mellett, kisebb kvantumszámú állapotok irányában mennek végbe. Egészen formális módon megadható, miként jut kifejezésre elméletünkben ez a körülmény; képezzük ebből a célból a (105) sugárzási mátrix átlaga helyett annak *átlósösszegét*; kapjuk:

$$D \left( \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{\mathbf{q}}^2 \right) = \frac{32\pi^4 e^2}{3c^3} \sum_{nk} v(nk)^4 |q(nk)|^2. \quad (108)$$

A jobb oldalon álló összeget átrendezve írhatjuk:

$$\frac{64\pi^4 e^2}{3c^3} \sum_n \left( \sum_{k < n} v(nk)^4 \cdot |q(nk)|^2 \right). \quad (109)$$

Ezzel elértük a kívánt hozzárendelést: Egy-egy  $n$  állapothoz az a sugárzás tartozik, amely az összes  $k < n$  állapotba vezető átmeneteknek felel meg; az intenzitást a klasszikus elméletből ismert képlet adja meg. Ez összhangban van a tapasztalattal, ha feltesszük, hogy az  $r$  indexek sorrendje a  $W_n$  energia növekedésének felel meg.

Ezzel Heisenberg feltevését a fent körülírt, korlátozott értelemben igazoltuk.

Itt nyomban hangsúlyozzuk, hogy ez az átmeneti valószínűségekre vonatkozó megállapítás független a rendszer nem-elfajult jellegének (azaz valamennyi  $W_n$  különbözőségének) feltételezésétől. Végül kiemeljük még, hogy az átmeneti valószínűségek meghatározása az állapotok *statisztikus súlyának* rögzítését is jelenti; mégpedig az egyes sorok és oszlopok, ill. a  $W$  átlós elemei jellemezték állapotok mind-egyikének *egyenlő* statisztikus súlyt kell tulajdonítanunk. Azt, hogy ez az eredmény (több szabadsági fokkal rendelkező rendszerekre általánosítva) automatikusan elvezet a fénykvantumok Bose—Einstein-féle statisztikájának alapelveihez, később fogjuk kifejteni.

*Megjegyzés korrektúrájánál.* Az elmélet ígért általánosítását több szabadsági fok esetére időközben  $W$ . Heisenberggel együtt kidolgoztuk és azt e munka folytatásában fogjuk kifejteni. Ott a különféle, már itt is érintett kérdéseket, melyek tisztázása terén időközben sikerült előbbre jutni, részletesebben meg fogunk tárgyalni.

Fordította: Györgyi Géza

#### IRODALOM ÉS JEGYZETEK

- [1] *W. Heisenberg*, ZS. f. Phys. **33**, 879, 1925 és Magyar Fizikai Folyóirat **13**, 447, 1965.
- [2] A mátrixszámításról bővebben olvashatunk *M. Bôcher* könyvében, Einführung in die höhere Algebra; angolból fordította *Hans Beck*, Leipzig, Teubner, 1910, §§ 22—25; ezen kívül *R. Courant* és *D. Hilbert* könyvében is, Methoden der mathematischen Physik I. Berlin, Springer, 1924. 1. fejezet.
- [3] Ismeretes, hogy véges négyzetes mátrixok esetén  $a^{-1}$ -et ez a definíció egyértelműen rögzíti, ha az a mátrix  $A$  determinánsa zérustól különbözik. Ha  $A=0$ , úgy az a mátrixnak nincs reciproka.
- [4] Általánosabban  $r$ -változós függvényekre

$$\sum_r \left( \mathbf{x}_r \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_r} - \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_r} \mathbf{x}_r \right) = 0$$

áll fenn.

[5] A bizonyítás itt választott módjának az az előnye, hogy lehetővé teszi a szoros kapcsolat felismerését, mely a permutációk, valamint a mátrixok általánosabb transzformációinak egy fontos osztálya között fennáll. A szóban forgó tétel helyességére azonban közvetlenül abból a megjegyzésből is következtethetünk, hogy a mátrixok *egyenlőségének*, valamint *összeadásának* és *szorzásának* definíciójában a sorok, ill. az oszlopok sorrendjére vonatkozóan nincs semmiféle utalás.

- [6] Lásd ezzel kapcsolatban a 8. §-t.
- [7] Vö. e dolgozat folytatásával.
- [8] *W. Thomas*, Naturw. **13**, 627, 1925.
- [9] *W. Kuhn*, ZS. f. Phys. **33**, 408, 1925.
- [10] Nem tartoznak bele a „korlátos” végtelen mátrixoknak a matematikusoktól eddig csaknem kizárólagosan vizsgált osztályába sem.
- [11] Egy másik általánosítást szolgáltatnak a

$$\begin{aligned} p^m q^n &= \sum_{j=0}^{m,n} j! \binom{m}{j} \binom{n}{j} \left( \frac{h}{2\pi i} \right)^j q^{n-j} p^{m-j}, \\ q^n p^m &= \sum_{j=0}^{m,n} j! \binom{m}{j} \binom{n}{j} \left( \frac{-h}{2\pi i} \right)^j p^{m-j} q^{n-j} \end{aligned}$$

képletek, ahol a  $j$  index  $m$  és  $n$  közül a kisebbig terjedő értékeken fut végig.



[12]  $A \mathbf{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + U(\mathbf{q})$  esetre (39') segítségével nyomban elvégezhető.

[13] Lásd *M. Born*, *Atommechanik* (Berlin 1925), 4. fejezet, 42. § 294. old.; a (6) képletben  $a=1/3$  irandó, hogy eredményünkkel egyezés adódjék.

[14] *M. Abraham*, *Theorie der Elektrizität*, II. Leipzig 1914.

[15] Bizonyos körülmények között az elektromágneses tér más felfogása válhat szükségessé, melyben a térkoordináták nem mint számok, hanem maguk is ismét mint mátrixok jelennek meg: ez mint következményt maga után vonja a térbeli differenciáhányadosok jelentésének megváltozását a Maxwell-egyenletekben. Erre a kérdésre a dolgozat folytatásában visszatérünk.

[16] Lásd pl. *P. Debye*, *Ann. d. Phys.* **30**, 755, 1909; (7'') képlet, 758. old.

Technikai szerkesztő: Turchányi György      Műszaki szerkesztő: Dáloki János  
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója  
A kézirat beérkezett: 1965. VIII. 12. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 8,5 (A/5) ív, 20 ábra

---

Szegedi Nyomda Vállalat 65-5798

MAGYAR  
AKADÉMIAI KIADÓ  
KÖNYVTÁRA



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.591

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Zimányi József: A stripping reakciót követő gamma-sugárzás cirkuláris polarizációja</i> .....	461
<i>Tompá János: Nemkristályos anyagok röntgen finomszerkezetének kutatása</i> .....	517

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>M. Born és P. Jordan: A kvantummechanikáról I.</i> .....	529
---	-----



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT 1964. ÉVI XII. KÖTETÉHEZ TÁRGYMUTATÓ

Oldal

<i>D. Blohincev</i> : Kvantumsokaságok .....	1
<i>Lakatos György és Bitó János</i> : Külső ellenállás hatása a pozitív oszlop mozgó rétegeire ....	9
<i>Makranczi Béla</i> : Alacsonyfeszültségű gázkisülési cső számlálási célra .....	11
<i>Kovács István és Benkő László</i> : Képlékenyen alakított fémekben tárolt energia mérése adiabatikus kaloriméterrel .....	31
<i>Abonyi Iván, Kövesy Zsuzsa és Szabó János</i> : Az általánosított Ohm-törvény mágneses plazmában .....	45
<i>Berkes László és Voszka Rudolf</i> : Hőkezelés hatása a NaJ(Tl) szcintillátorok minőségére ....	59
<i>Bitó János</i> : Az alacsony nyomású egyenáramú gázkisülések anódi oldalon fellépő rezgéseiről .....	63
<i>Bitó János</i> : A váltóáramú gázkisülések egyes paramétereinek nyomásfüggéséről .....	111
<i>Bitó János és Szemző Imre</i> : Szondamérési eljárás váltóáramú kisülésekhez .....	121
<i>Nagy Tibor</i> : A nullától különböző neutrino-tömeg hatása a $\mu$ -mezonok bomlási állandójára .....	133
<i>Fáy Gyula és Zselev Borisz</i> : Örmények néhány műszaki fizikai kérdése .....	151
<i>Hédervári Péter</i> : A Föld belső szerkezetéről. I. rész .....	223

### Plazmafizikai tanácskozás:

<i>Szabó János</i> : A plazma statisztikus leírásának különböző módszerei .....	241
<i>Abonyi Iván</i> : A magnetohidrodinamika alapegyenletei anizotróp közegekben .....	245
<i>Ryszard Gajewski</i> : Alfvén-hullámok inhomogén mágneses erőterben .....	251
<i>Andrzej Skorupski</i> : Alfvén-hullámok visszaverődése a mágneses erőter lokalizált inhomogenitásáról .....	253
<i>Demjén József és Firtó János</i> : Vezető folyadékok áramlása homogén külső mágneses térben koaxiális hengerek között .....	255
<i>Csada Imre</i> : Magnetohidrodinamikai dinamóelmélet .....	261
<i>Nagy Ernő</i> : A plazmafizika alkalmazása elektromos rakétahajtóművek szerkesztésére .....	267
<i>Wiedemann László</i> : Ion-ion rekombináció meghatározása alacsony nyomáson .....	279
<i>Nagy János</i> : Mérések a Penning-féle ionforrásra vonatkozóan .....	287
<i>Bitó János</i> : Az egyenáramú higanygőzkisülések egyes paramétereinek között fennálló összefüggésekről .....	297
<i>Lakatos György és Bitó János</i> : A környezethőmérséklet befolyása az alacsonynyomású kisülések mozgó rétegződési folyamataira .....	311
<i>Pirkó József</i> : Saválló acélok védőgáz ivvágása .....	321
<i>Lakatos György és Bitó János</i> : A váltakozó áramú gázkisülések mellett alkalmazott segédelektroda szerepéről .....	337
<i>Lakatos György és Bitó János</i> : Néhány külső és belső paraméter hatása a mozgórétegződésre .....	343
<i>Lakatos György és Bitó János</i> : Stacionér kisülés oxidkatódjának párolgási sebességéről ....	349
<i>Bitó János</i> : A kisülések anódrezgései .....	353
<i>Lakatos György és Bitó János</i> : A mozgó rétegződések néhány paraméteréről .....	369
<i>Szigeti György, Lakatos György és Bitó János</i> : Kalorikus módszer kisülések anódésésének meghatározása .....	379
<i>Fodor Ilona</i> : Direkt és compound folyamatok interferenciájának hatása a $(p, \gamma)$ reakciókra .....	427

<i>Sárossy József</i> : Az elektromágneses erőkről .....	439
<i>B. L. van der Waerden</i> : A kizárási elv és a spin .....	453
<i>Lovas István</i> : A $\text{Cl}^{36}$ atommag alap- és gerjesztett állapotainak vizsgálata .....	499
<i>Hédervári Péter</i> : A Föld belső szerkezetéről II. rész .....	545

#### A LABORATÓRIUMBÓL

<i>Martin Róbert</i> : Laboratóriumban épített molibdén fűtésű kemence hidrogén öblítéssel .....	71
<i>Vödrös Dániel</i> : Gamma-spektrum felvétele szcintillációs spektrométerrel .....	73
<i>Holnapy Dezső</i> : A földkéreg hőmérsékletének meghatározása analógia segítségével .....	81
<i>Bujdosó Ernő</i> : Ipari radioizotóp-nyomjelzéses vizsgálatok mérés technikájáról .....	491

#### A FOLYÓ IRODALOMBÓL

<i>Horváth János</i> : Termodinamikai perturbációs számítás .....	173
<i>Krén Emil és Praveczi Endre</i> : Mágneses szerkezetek osztályozása és neutron diffrakciós meghatározásának módszerei .....	387

#### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>Wigner Jenő</i> : A Schrödinger-féle elméletből a term-szerkezetekre vonatkozóan adódó néhány következtetés .....	85
<i>Wigner Jenő</i> : Az időtükrözés a kvantummechanikában .....	213
<i>G. C. Wick, A. S. Wightman és Wigner Jenő</i> : Az elemi részek sajátparitása .....	327
<i>Wolfgang Pauli</i> : A spin és a statisztika kapcsolata .....	415
<i>Julian Schwinger</i> : A kvantált terek elmélete .....	561



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT 1964. ÉVI XII. KÖTETÉHEZ NÉVMUTATÓ

	Oldal
<i>Abonyi Iván, Kövesy Zsuzsa és Szabó János: Az általánosított Ohm-törvény mágneses plazmában</i> .....	45
<i>Abonyi Iván: A magnetohidrodinamika alapegyenletei anizotróp közegekben</i> .....	245
<i>Benkő Lázár l. Kovács</i> .....	31
<i>Berkes László és Voszka Rudolf: Hőkezelés hatása a NaJ(Tl) szcintillátorok minőségére</i> ..	59
<i>Bitó János: Az alacsony nyomású egyenáramú gázkisülések anódi oldalon fellépő rezgéseiről</i> ..	63
<i>Bitó János: A váltóáramú gázkisülések</i> .....	113
<i>Bitó János és Szemző Imre: Szondamérési eljárás váltóáramú kisülésekhez</i> .....	121
<i>Bitó János: Az egyenáramú higanygőzkisülések egyes paraméterei között fennálló összefüggésekről</i> .....	297
<i>Bitó János: A kisülések anódrezgései</i> .....	353
<i>Bitó János l. Lakatos</i> .....	9, 311, 337, 343, 369
<i>Bitó János l. Szigeti</i> .....	379
<i>Blohincev D.: Kvantumsokaságok</i> .....	1
<i>Bujdosó Ernő: Ipari radioizotóp-nyomjelzéses vizsgálatok mérés technikája</i> .....	491
<i>Csada Imre: Magnetohidrodinamikai dinamóelmélet</i> .....	261
<i>Demjén József és Firtkó János: Vezető folyadékok áramlása homogén külső mágneses térben koaxiális hengerek között</i> .....	255
<i>Fáy Gyula és Zselev Borisz: Örlemények néhány műszaki kérdése</i> .....	151
<i>Firtkó János l. Demjén</i> .....	255
<i>Fodor Ilona: Direkt és compound folyamatok interferenciájának hatása a (<math>p, \gamma</math>) reakciókra</i> ..	427
<i>Gajewski Ryszard: Alfven hullámok inhomogén mágneses erőterben</i> .....	251
<i>Hédervári Péter: A Föld belső szerkezetéről. I. rész</i> .....	223
<i>Hédervári Péter: A Föld belső szerkezetéről. II. rész</i> .....	545
<i>Holnapy Dezső: A földkéreg hőmérsékletterének meghatározása elektromos analógia segítségével</i> .....	81
<i>Horváth János: Termodinamikai perturbációs számítás</i> .....	173
<i>Kovács István és Benkő Lázár: Képlékenyen alakított fémekben tárolt energia mérése adiabatikus kaloriméterrel</i> .....	31
<i>Kövesy Zsuzsa l. Abonyi</i> .....	45
<i>Krén Emil és Praveczi Endre: Mágneses szerkezetek osztályozása és neutrondiffrakciós meghatározásának módszerei</i> .....	387
<i>Lakatos György és Bitó János: Külső ellenállás hatása a pozitív oszlop mozgó rétegeire</i> .....	9
<i>Lakatos György és Bitó János: A környezethőmérséklet befolyása az alacsonynyomású kisülések mozgó rétegződési folyamataira</i> .....	311
<i>Lakatos György és Bitó János: A váltakozó áramú gázkisülések katódja mellett alkalmazott segédelektroda szerepéről</i> .....	337
<i>Lakatos György és Bitó János: Néhány külső és belső paraméter hatása a mozgórétegződésre</i> ..	343
<i>Lakatos György és Bitó János: Stacionér kisülés oxidkatódjának párolgási sebességéről</i> ....	349
<i>Lakatos György és Bitó János: A mozgó rétegződések néhány paraméteréről</i> .....	369
<i>Lakatos György l. Szigeti</i> .....	379

<i>Lovas István</i> : A $\text{Cl}^{36}$ atommag alap- és gerjesztett állapotainak vizsgálata .....	499
<i>Makranczi Béla</i> : Alacsony feszültségű gázkisülési cső számlálási célra .....	11
<i>Martin Róbert</i> : Laboratóriumban épített molibdén fűtésű kemence hidrogén öblítéssel.....	71
<i>Nagy Ernő</i> : A plazmafizika alkalmazása elektromos rakétahajtóművek szerkesztésére .....	267
<i>Nagy János</i> : Mérések a Penning-féle ionforrásra vonatkozóan .....	287
<i>Nagy Tibor</i> : A nullától különböző neutrínó-tömeghatása a kötött $\mu$ -mezonok bomlási állapotjára .....	133
<i>Pauli Wolfgang</i> : A spin és a statisztika kapcsolata .....	415
<i>Pirkó József</i> : Saválló acélok védőgáz asztigása .....	321
<i>Praveczi Endre I. Krén</i> .....	387
<i>Sárossy József</i> : Az elektromágneses erőkről .....	439
<i>Schwinger Julian</i> : A kvantált terek elmélete .....	561
<i>Skorupski Andrzej</i> : Alfén-hullámok visszaverődése a mágneses erőter lokalizált inhomogenitásáraól .....	253
<i>Szabó János I. Abonyi Iván</i> .....	45
<i>Szabó János</i> : A plazma statisztikus leírásának különböző módszerei.....	241
<i>Szemző Imre I. Bitó</i> .....	121
<i>Szigeti György, Lakatos György és Bitó János</i> : Kalórikus módszer kisülések anódosésének meghatározására .....	379
<i>Voszka Rudolf I. Berkes</i> .....	59
<i>Vödrös Dániel</i> : Gamma-spektrum felvétele szcintillációs spektrométerrel .....	73
<i>Waerden B. L.</i> : A kizárási elv és a spin .....	453
<i>Wick G. C., Wightman A. S. és Wigner Jenő</i> : Az elemi részek saját paritása .....	327
<i>Wiedemann László</i> : Ion-ion rekombináció meghatározása alacsony nyomáson .....	279
<i>Wightman A. S. I. Wick</i> .....	327
<i>Wigner Jenő</i> : A Schrödinger-féle elméletből a term-szerkezetekre vonatkozóan adódó néhány következtetés .....	85
<i>Wigner Jenő</i> : Az időtükrözés a kvantummechanikában .....	213
<i>Wigner Jenő I. Wick</i> .....	327
<i>Zselev Borisz I. Fáy</i> .....	151